

ELIANE PEREIRA SERRA XAVIER

**Duas partículas quânticas confinadas num bilhar circular
e interagindo via potencial de Yukawa.**

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Paraná, como requisito à obtenção do grau de Mestre em Ciências.

Orientador: Prof. Dr. Marcus W. Beims

CURITIBA
2003

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

ATA DE DEFESA DE TESE DE MESTRADO

ELIANE PEREIRA SERRA XAVIER

TÍTULO: “DUAS PARTÍCULAS QUÂNTICAS CONFINADAS NUM BILHAR CIRCULAR INTERAGINDO VIA POTENCIAL DE YUKAWA.”

Em sessão pública iniciada às dez horas, nesta data, após um Seminário sob o título acima, e posterior arguição por esta banca examinadora, esta decidiu atribuir a candidata o conceito global

A.

Banca Examinadora

Prof. MARCUS WERNER BEIMS
(Orientador/Presidente) (UFPR)

Prof. JASON ALFREDO CARLSON GALLAS
(UFRGS)

Prof. RICARDO LUIZ VIANA
(UFPR)

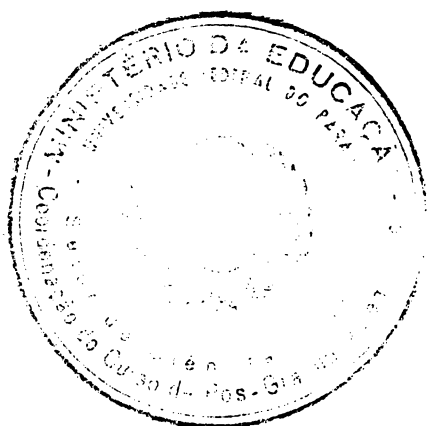
Assinatura

Conceito

Marcus W. B. A

[Assinatura] A

[Assinatura] A



Curitiba, 25 de março de 2003.

Agradecimentos

Quero deixar registrada para sempre a minha gratidão às pessoas e instituições que tanto contribuíram para que eu pudesse completar este mestrado.

Agradeço:

Ao meu amado marido, Fred, que tanto me apoia e demonstra seu amor por mim.

Aos meus pais e meus irmãos pelo incentivo que me deram e pelo investimento que fizeram em mim.

Ao meu orientador Prof. Marcus W. Beims, que acreditou em mim e se empenhou muito neste projeto.

Ao Prof. Marcos Gomes pela sugestão do tema da dissertação e pelo seu trabalho de co-orientador.

Ao Luis Gregório pela importante colaboração no trabalho.

Ao Marcos César Santos, grande companheiro de trabalho, cuja contribuição foi incrível.

Ao Prof. Carlos Carvalho pelo suporte e contribuições na área de informática.

Aos demais professores do departamento que colaboraram na minha formação.

Aos companheiros do curso de pós-graduação que sempre estiveram prontos a dar sua ajuda.

A todos os meus amigos que mesmo não estando presentes aqui na Universidade tiveram um papel fundamental na minha motivação para o trabalho.

A CAPES pela ajuda financeira.

Conteúdo

1	Introdução	7
2	Caracterização do Caos Quântico	11
2.1	Integrabilidade e Sistemas Caóticos	11
2.2	Simetrias	14
2.3	Caracterização do Caos em Sistemas Quânticos	15
2.3.1	Teoria das Matrizes Randômicas (TMR)	15
2.3.2	Estatística $P(s)$	18
2.3.3	Estatística $\overline{\Delta_3}$	18
2.3.4	Cicatrices	20
2.3.5	Caos ondulatório	20
3	Bilhares	22
4	Partícula livre no bilhar	27
4.1	Primeiro caso: Uma partícula	27
4.2	Segundo caso: Duas partículas sem interação	32
5	Duas partículas interagentes no bilhar	34
6	Procedimentos Numéricos	43
7	Resultados	47
7.1	Massas iguais	49
7.1.1	$L = 0$	50
7.1.2	$L = 1$ e $L = 2$	52
7.2	Massas diferentes	53
7.2.1	$L = 0$	54
7.2.2	$L = 1$ e $L = 2$	65

7.3	Repulsão dos níveis	68
8	Conclusões	71

Resumo

O problema da interação mútua entre muitas partículas confinadas em bilhares de diferentes formas (quadrados, retangulares, poligonais, etc...) com diferentes condições de contorno que devem ser impostas às funções de onda é um assunto de particular destaque no estudo de sistemas quânticos cujo análogo clássico é caótico. Neste trabalho apresentamos resultados quânticos sobre um modelo de um bilhar circular com duas partículas interagentes via um potencial do tipo Yukawa. O potencial de Yukawa tem sido usado para modelar potenciais de curto alcance na física nuclear bem como para simular efeitos de interação residual em pontos quânticos. Determinamos o espectro de energia deste sistema e a partir disso fazemos uma análise da estatística dos níveis. A partir da variação de alguns parâmetros que são definidos no trabalho, obtivemos resultados que conjecturam uma dinâmica regular, caótica ou mista, dependendo dos valores que estes parâmetros assumem. Obtivemos estatísticas de níveis do tipo GOE (Gaussian Orthogonal Ensemble) (caso em que a dinâmica do sistema clássico é caótica) para o caso das partículas com massas diferentes. Para o cálculo dos níveis de energia usamos as autofunções do problema de duas partículas não interagentes no bilhar circular. Mostramos uma interessante oscilação entre dinâmica regular e caótica em função da razão entre as massas das partículas. Argumentos clássicos de colisão entre as partículas são usados para explicar este comportamento.

Abstract

The problem of many interacting particles under different boundary conditions (for instance, square, rectangular and polygonal billiards) has been an interesting subject to study the quantum dynamics if the analogous classical is chaotic. In this work we present quantum results of two interacting particles moving in a circular billiard. The Yukawa potential is assumed to describe the interaction between the particles. This potential has been used in nuclear physics to model short range potentials and to simulate residual interactions in quantum wells. We find the energy spectrum of the system and perform the level statistics. By varying some parameters, that are defined later, we obtain some results that conjecture a regular, chaotic or mixed dynamics for the quantum problem depending on the values of the parameters. We obtain level statistics of the GOE (Gaussian Orthogonal Ensemble) type when particles have different masses. To calculate the energy levels we use the eigenfunctions of the free particles case. We show an interesting oscillation between a regular and a chaotic dynamics as a function of the ratio of the particles masses. Classical arguments are used to explain this behavior.

Capítulo 1

Introdução

Um problema interessante e desafiador na física é a relação entre sistemas classicamente caóticos e seus análogos quânticos. A descrição quântica de sistemas clássicos caóticos é chamada como forma abreviada de caos quântico.

A análise de caos em sistemas quânticos difere do caso clássico em alguns aspectos. Podemos citar, por exemplo, o aspecto do sistema apresentar ou não sensível dependência às condições iniciais. Devido ao princípio da incerteza, quando trabalhamos com sistemas quânticos, a condição inicial de uma partícula não pode ser conhecida com precisão, o que torna esta análise inviável. Outro aspecto relevante é em relação a linearidade das equações que descrevem o sistema. A equação de Schrödinger é uma equação linear não deixando espaço para caos, já que a dinâmica caótica está relacionada com a não-linearidade das equações que descrevem o sistema. Sendo assim, alguns outros títulos, como “caos e física quântica” [1] foram sugeridos. Berry [2] mais uma vez propôs o termo “estudo quântico do caos”, introduzido por ele anteriormente [3], mas nenhuma destas propostas foram aceitas pela maioria. Nos dias de hoje o termo “caos quântico” é entendido como abrangendo todos os problemas relativos ao comportamento quântico de sistemas clássicos caóticos.

Bilhares clássicos nos oferecem uma interessante compreensão de sistemas dinâmicos. A dinâmica de uma partícula confinada num plano entre paredes rígidas depende de maneira particular da forma (geométrica) do bilhar. Para um problema de N-corpos, contudo, a interação mútua também se apresenta como uma

regra fundamental [4]. A emergência de caos quântico nestes casos é devida então não mais somente a geometria e forma do potencial externo mas também aos fatores intrínsecos ao tipo de interação.

A análise tanto clássica quanto quântica de muitos corpos interagentes é de grande importância em vários campos da física, desde a mecânica celeste até átomos, núcleos e física de partículas. O sucesso da moderna nanotecnologia na fabricação e manipulação de pontos quânticos tem resultado em considerável interesse no estudo teórico dos processos físicos que ocorrem em nano-estruturas. Esta área relativamente nova já tem contribuído para o entendimento de problemas mais realísticos. Podemos citar como exemplos na física atômica os efeitos do campo magnético em átomos de hidrogênio [5] e o átomo de hélio [6], assim como as propriedades dinâmicas de átomos pesados [7].

Outros tipos de sistemas onde muitos resultados, tanto experimentais quanto teóricos, têm mostrado manifestações de caos quântico é em semicondutores e pontos quânticos [8]. Normalmente estes são descritos por bilhares, assunto que será discutido mais detalhadamente no capítulo 3. Sistemas com duas partículas interagentes em bilhares clássicos e sua respectiva análise quântica têm sido estudados por Meza-Montes e Ulloa [9]. Em recentes trabalhos [8, 9, 10] têm sido observado que interações entre elétrons podem desempenhar um fator importante no transporte em pontos quânticos. Desta forma temos que a análise de bilhares com muitas partículas interagindo é de grande relevância, tanto conceitualmente quanto na prática. Atualmente temos estudos com bilhares clássicos uni e bidimensionais em sistemas com uma ou mais partículas [11, 12], e sistemas quânticos com mais partículas em geometrias unidimensionais [13].

Apresentamos nesta dissertação um modelo quântico para um bilhar circular bidimensional com duas partículas confinadas no seu interior. As partículas interagem no interior do bilhar via um potencial do tipo Yukawa. Este tipo de potencial foi escolhido, entre outros fatores, por ter um parâmetro de alcance bem definido. Além disso sua forma exponencial nos permite modelar qualquer interação residual que ocorra no sistema. A motivação para o trabalho foi a possível aplicação de tais modelos quânticos para descrever sistemas com várias partículas em situações

realísticas, como por exemplo, os quarks dentro de um nucleon. O objeto de estudo e análise serão os níveis de energia do modelo acima citado.

Tendo em vista o interesse em fazer a descrição quântica para um bilhar de partículas interagentes, o objetivo deste trabalho foi estudar da forma mais completa possível o sistema de duas partículas interagindo via um potencial do tipo Yukawa, num bilhar circular bidimensional.

A definição de um parâmetro relativo à razão entre as massas das partículas foi também de importância crucial para que obtivéssemos resultados mais abrangentes sobre a dinâmica do sistema. Uma análise clássica da distribuição dos vários momentos lineares, devido ao choque das partículas, em função das massas foi feita por Casati et al [15]. O efeito desta distribuição dos momentos lineares foi também analisado por Van Vessen et al [13] em bilhares quânticos unidimensionais, onde a razão entre as massas se demonstrou ser também um aspecto fundamental no tipo de dinâmica do sistema.

Podemos resumir da seguinte forma os pontos principais deste trabalho:

- (i) Montar e diagonalizar o Hamiltoniano, encontrando os níveis de energia do sistema perturbado e fazer as estatísticas de níveis;
- (ii) Analisar a dinâmica do sistema interagente, no sentido dela ser regular, mista ou caótica, sob a variação dos parâmetros que influenciam intrinsecamente o sistema.

No capítulo 2 faremos uma breve apresentação de alguns conceitos que são relacionados ao assunto da dissertação. Falaremos de integrabilidade e comportamento caótico de um sistema, já introduzindo alguns conceitos estatísticos de singular importância para as conclusões da pesquisa. Alguns comentários sobre simetrias em sistemas quânticos serão também apresentados e em seguida veremos um pouco da teoria das matrizes randômicas. As estatísticas $P(s)$ e $\overline{\Delta}_3$ serão comentadas em sequência. Finalizando o capítulo, apresentamos ainda o conceito de caos ondulatório. Esta recente descoberta, do chamado caos ondulatório [16], se refere a classes de sistemas onde as características de caos quântico surgem apesar de seus

análogos clássicos não apresentarem caos. Este ponto está em contraste ao que foi mencionado anteriormente com a definição de caos quântico.

Bilhares que demonstram dinâmica regular e também outros com dinâmica caótica serão o assunto do capítulo 3, assim como alguns fatores de transição de um caso para o outro.

No capítulo 4 apresentaremos as soluções analíticas para a descrição quântica de um sistema com uma e depois duas partículas livres confinadas num bilhar circular. Começaremos o estudo analítico do bilhar circular com as duas partículas interagentes confinadas em seu interior no capítulo 5. Apresentaremos o Potencial de Yukawa, bem como os parâmetros que utilizaremos para variar sua intensidade e seu alcance dentro do bilhar. Neste capítulo utilizaremos a base de autovetores do caso anterior (das duas partículas confinadas sem interação) para expandir este caso das partículas interagentes. Montaremos qualitativamente a representação matricial do Hamiltoniano e encontraremos as integrais que nos levarão aos elementos da matriz.

O capítulo 6 trata de forma detalhada dos procedimentos numéricos que utilizamos para montar e diagonalizar a representação matricial do Hamiltoniano. No capítulo 7 apresentaremos alguns dos resultados obtidos. O parâmetro relativo à razão entre as massas das partículas será então definido, visando a análise dos resultados para o sistema de partículas com massas iguais e massas diferentes. As estatísticas de níveis realizadas para várias combinações dos três parâmetros definidos, V_0 (intensidade do potencial), α (alcance do potencial) e γ (razão $\frac{\mu_2}{\mu_1}$ entre as massas das partículas 2 e 1, respectivamente), nos permitirão conjecturar aspectos da dinâmica do sistema, como o fato dela se apresentar integrável, caótica ou mista. Os resultados obtidos, considerando principalmente a variação do parâmetro γ , da relação entre as massas, nos conduzirão a uma interessante discussão sobre a influência deste aspecto intrínseco do sistema na sua dinâmica. Serão apresentados também alguns gráficos dos níveis de energia em função do potencial onde poderemos ver a repulsão entre os níveis, aspecto característico de um sistema que apresenta caos. As conclusões e sugestões para trabalhos futuros serão apresentadas no capítulo 8.

Capítulo 2

Caracterização do Caos Quântico

Começaremos este capítulo abordando brevemente uma discussão que se faz bastante extensa na literatura sobre a dinâmica integrável ou não de sistemas clássicos e seus análogos quânticos. Em seguida, também de forma breve, falaremos sobre simetrias. Ainda na análise do tipo de dinâmica que um sistema pode apresentar, faremos uma introdução no conceito de matrizes randômicas e em alguns métodos estatísticos que são utilizados para verificar a existência ou não de caos na dinâmica de um sistema. Para uma visão mais geral do assunto, finalizamos o capítulo com um comentário sobre cicatrizes e caos ondulatório. Todos estes conceitos demonstram um razoável grau de complexibilidade e para sua total compreensão exigiriam uma mais extensa discussão. Como este não é o objetivo deste trabalho apresentamos neste capítulo apenas alguns aspectos destes conceitos que se mostram interessantes comentar dentro do problema aqui tratado.

2.1 Integrabilidade e Sistemas Caóticos

Seja um sistema Hamiltoniano com N graus de liberdade. Se a equação de Hamilton-Jacobi for separável em N equações independentes, a Hamiltoniana é dita integrável. As constantes de separação I_i são chamadas constantes ou integrais de movimento [17]. No sentido de Liouville (1855), um sistema com N graus de liberdade é integrável se existem N constantes de movimento. Além disso, estas N constantes I_i devem estar em involução, ou seja, os parêntesis de Poisson devem se anular para cada par de constantes $\{I_i, I_j\} = 0$.

A dinâmica de um sistema clássico pode ser regular, no caso dele ser integrável, mista ou caótica. Uma característica de um sistema que exibe caos é demonstrar sensível dependência às condições iniciais.

Para ilustração, vamos considerar a evolução de um sistema clássico, observando duas condições iniciais vizinhas $\mathbf{x}_1(0)$ e $\mathbf{x}_2(0) = \mathbf{x}_1(0) + \Delta(0)$. Imaginamos que elas são evoluídas através do tempo por um sistema dinâmico contínuo dependente do tempo. As órbitas $\mathbf{x}_1(t)$ e $\mathbf{x}_2(t)$ podem ser vistas na figura 2.1.

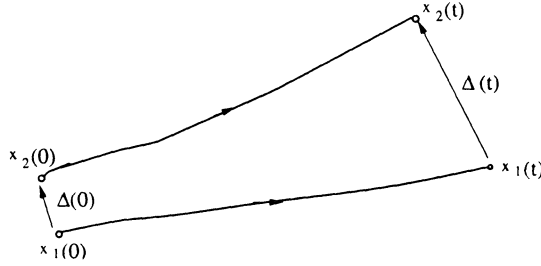


Figura 2.1: Evolução no espaço de fase de duas trajetórias vizinhas.

Num tempo t a separação entre as duas órbitas é $\Delta(t) = \mathbf{x}_2(t) - \mathbf{x}_1(t)$. Se no limite $|\Delta(0)| \rightarrow 0$, ou seja, para condições iniciais o mais próximas possível, e para um grande valor de t , as órbitas continuam evoluindo e a diferença entre as distâncias que as separam ($|\Delta(t)|$) cresce exponencialmente em relação a $\Delta(0)$ (isto é, $|\Delta(t)/\Delta(0)| \sim \exp(ht)$, $h > 0$), então dizemos que o sistema demonstra sensível dependência às condições iniciais e é caótico.

Na descrição quântica de sistemas clássicos observamos algumas características que distinguem também a dinâmica integrável da caótica. A análise estatística dos níveis de energia de um sistema quântico, que será vista com mais detalhes na seção 2.2.1, é uma das propostas utilizadas para verificar se o sistema é integrável ou não. Um exemplo típico de um sistema não-integrável é o núcleo atômico. Os níveis de energia de um grande número de núcleos, incluindo seus números quânticos, têm sido determinados na espectroscopia nuclear [18]. Para esta análise estatística, no caso de núcleos atômicos, devemos primeiro organizar os níveis de energia em um subespectro com dado momento angular e paridade de números quânticos, que são as constantes de movimento neste caso, além da energia total. A distribuição $P(s)$ dos espaçamentos s_n entre os autovalores vizinhos e_n e e_{n+1} (níveis de energia vizinhos após o desdobramento do espectro) é a mais conhecida propriedade espectral. Como exemplo apresentamos na figura 2.2 os resultados da

famosa compilação de níveis de energia de um grande número de diferentes núcleos e classes de simetria feita por Bohigas e colaboradores [19, 20]. Na literatura o conjunto de dados é conhecido como *ensemble de dados nucleares*. A linha sólida (GOE) corresponde a distribuição de Wigner:

$$P(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right). \quad (2.1)$$

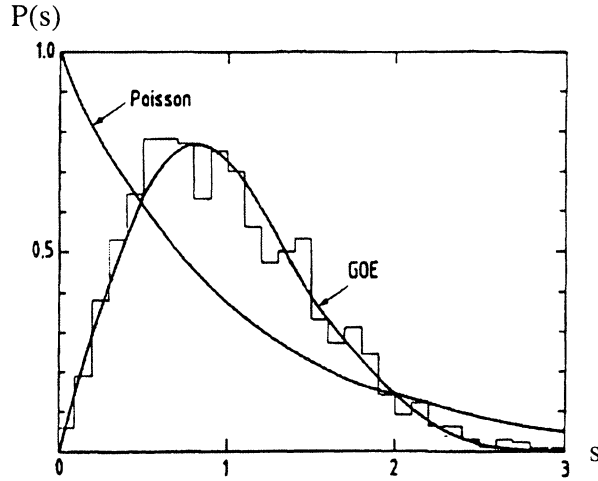


Figura 2.2: Distribuição da distância entre os vizinhos próximos para os dados do ensemble nuclear. No eixo horizontal temos os espaçamentos s_n . O histograma contém ao total 1726 níveis de energia de 32 diferentes núcleos. A linha sólida corresponde a distribuição de Wigner (figura extraída de [21]).

No caso de um sistema integrável o histograma do espaçamento entre os auto-valores vizinhos se apresenta de um modo diferente, se aproximando da outra linha sólida, que também pode ser vista na figura 2.2, a qual corresponde a distribuição de Poisson.

Nos sistemas integráveis temos uma maior concentração dos espaçamentos próximo a origem, enquanto que na distribuição de Wigner isso não ocorre, demonstrando que os autovalores tendem a se repelir uns aos outros. É essencial que somente subespectros pertencentes ao mesmo conjunto de número quânticos entrem na análise, como foi citado neste exemplo do núcleo atômico, ao organizar os níveis em um subespectro com dado momento angular e paridade de números quânticos.

2.2 Simetrias

Simetria é um conceito de grande importância na Física. Na mecânica clássica simetrias estão associadas a constantes de movimento, enquanto que na mecânica quântica toda simetria dá origem a um novo número quântico. Os sistemas conservativos são de especial importância. Se o operador Hamiltoniano H não depende explicitamente do tempo então a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (2.2)$$

pode ser separada da forma

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right), \quad (2.3)$$

onde $\psi_n(x)$ obedece a equação de Schrödinger estacionária

$$H\psi_n = E_n\psi_n. \quad (2.4)$$

Para Hamiltonianos conservativos a energia é consequentemente uma constante de movimento, com um número quântico correspondente n qualificando as auto-energias do sistema. Se houver mais simetrias, o sistema pode ser mais simplificado. O problema de resolver a Equação de Schrödinger fica reduzido a diagonalização da representação matricial do Hamiltoniano [21]. Vamos assumir que o operador Hamiltoniano é invariante com respeito a uma operação de simetria, por exemplo, associada a um operador R . Através de uma conveniente escolha de base e montagem da matriz poderemos tê-la na forma bloco-diagonal. Podemos então, ao invés de diagonalizar toda a matriz, diagonalizar um único bloco, não misturando assim níveis de energia que não estão correlacionados entre si, relativos a diferentes números quânticos. Grande parte do processo de diagonalização foi realizado automaticamente, pelo uso de mera simetria.

2.3 Caracterização do Caos em Sistemas Quânticos

Como já foi dito anteriormente, alguns critérios são utilizados para a caracterização do caos em sistemas quânticos. Veremos agora de forma um pouco mais detalhada a análise estatística dos níveis de energia. As principais entre elas são a estatística $P(s)$ e a estatística $\overline{\Delta}_3$. No caso do sistema apresentar caos as estatísticas concordam com os resultados obtidos da teoria das matrizes randômicas, apresentada a seguir.

2.3.1 Teoria das Matrizes Randômicas (TMR)

A TMR foi inicialmente concebida para analisar a possibilidade de algum ordenamento no espectro de núcleos complexos. Era conceituada como uma aproximação estatística para um sistema com maior número de graus de liberdade. A teoria foi desenvolvida nos anos cinquenta e sessenta por Wigner, Dyson, Mehta e outros. O interesse na TMR cresceu enormemente quando Bohigas, Giannoni e Schmit [22] presumiram que a teoria poderia ser aplicada para todos os sistemas caóticos, independente do sistema físico considerado. Nos anos seguintes fortes evidências foram obtidas comprovando que esta suposição estava correta.

Duas monografias neste assunto devem ser mencionadas. A primeira, *Random Matrices* foi escrita por Mehta [23], um dos pioneiros na área. E este é, contudo, um livro para especialistas. A outra monografia, *Assinaturas Quânticas do Caos*, de Haake [24], tem agora poucos anos depois de sua primeira aparição, se tornado a introdução padrão neste campo. Em vista da literatura já existente serão utilizados aqui somente conceitos básicos cujo conhecimento é indispensável para uma introdução no assunto. Deduções matemáticas serão apresentadas apenas como exemplos para dar uma idéia da técnica aplicada.

Ensembles Gaussianos

Definiremos agora os três tipos de ensembles genéricos de matrizes randômicas, que são definidos em termos das propriedades de simetria dos Hamiltonianos.

Distribuições de Wigner para o espaçamento de vizinhos próximos são observadas em uma grande variedade de sistemas, desde núcleos atômicos até bilhares de microondas. A aproximação introduzida por Wigner difere em modo fundamental

da aplicação padrão dos conceitos estatísticos em física. Na mecânica estatística padrão consideramos um ensemble de sistemas físicos *idênticos*, todos governados pelo mesmo Hamiltoniano mas diferindo nas condições iniciais, e calculamos as funções termodinâmicas pela média sobre este ensemble. Wigner procedeu de modo diferente: Ele considerou ensembles de sistemas dinâmicos governados por Hamiltonianos *diferentes* com algumas propriedades de simetrias em comum. Esta nova aproximação estatística focaliza sua atenção nas propriedades *genéricas* que são comuns a (quase) todos os membros do ensemble e as quais são determinadas pelas simetrias subjacentes.

Assume-se sempre que todo número quântico conservado, como spin ou paridade, são utilizados de modo que a representação matricial do Hamiltoniano se torne bloco-diagonal, cada bloco sendo caracterizado por um conjunto fixo de tais números quânticos. Trabalhamos apenas com um único bloco em muitos casos.

Usando os resultados do grupo teórico de Wigner [25], Dyson [26], existem três ensembles genéricos de matrizes randômicas, definidos em termos das propriedades de simetria dos Hamiltonianos.

1. Sistemas invariantes por reversão temporal e com simetria rotacional. Para tais sistemas os Hamiltonianos podem ser escolhidos reais e simétricos,

$$H_{mn} = H_{nm} = H_{mn}^*. \quad (2.5)$$

Sistemas invariantes por reversão temporal com spin inteiro e simetria rotacional quebrada também pertencem a este ensemble.

2. Sistemas nos quais a invariância por reversão temporal é violada. Um exemplo é o Hamiltoniano de um elétron num campo magnético externo fixo. Para tais sistemas os Hamiltonianos são Hermiteanos,

$$H_{mn} = H_{mn}^\dagger. \quad (2.6)$$

3. Sistemas invariantes por reversão temporal com spin semi-inteiro e simetria rotacional quebrada. As matrizes podem ser escritos em termos das matrizes de spin de Pauli σ_γ com $\gamma = 1, 2, 3$. Os Hamiltonianos têm a forma

$$H_{mn} = H_{mn}^{(0)} 1_2 - i \sum_{\gamma=1}^3 H_{mn}^{(\gamma)} \sigma_{\gamma}, \quad (2.7)$$

onde todas as quatro matrizes $H_{mn}^{(\gamma)}$ com $\gamma = 0, \dots, 3$ são reais e $H_{mn}^{(0)}$ é simétrica enquanto $H_{mn}^{(\gamma)}$ com $\gamma = 1, 2, 3$ são anti-simétricas.

Os três ensembles canônicos são então definidos: A primeira simetria corresponde ao Ensemble Ortogonal Gaussiano (GOE). O Ensemble Unitário Gaussiano é relativo a segunda simetria (GUE) e a terceira simetria corresponde ao Ensemble Simplético Gaussiano (GSE).

Desdobramento

Antes de chegarmos aos resultados que nos interessam, o espectro E_i deve ser colocado de uma forma que possa ser comparado quantitativamente com espectros de outros sistemas. Isto é obtido utilizando-se um procedimento chamado desdobramento, que consiste em converter o espectro de energias E_i em um conjunto de número adimensionais e_i . Isto é obtido traçando-se um histograma cumulativo de E_i ($N(E)$ na figura 2.3), o que nos permite estimar o número de autoestados com energia menor ou igual a E_i . Ajustando uma função $N_{av}(E_i)$ ($N_{av}(E)$ na figura 2.3) a este histograma, podemos obter o novo espectro definido, agora, como $e_i = N_{av}(E_i)$.

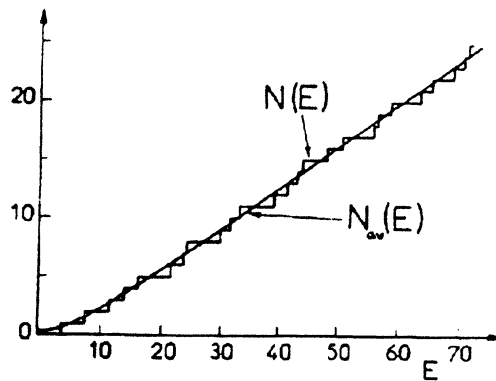


Figura 2.3: Espectro da distribuição dos níveis de energia $N(E)$, e espectro desdobrado (“unfolded”) $N_{av}(E)$. Figura extraída de [43].

Utilizando-se o espectro desdobrado a distribuição dos espaçamentos $s_i = e_{i+1} - e_i$ entre dois níveis sucessivos pode ser lançada em um histograma $P(s)$.

2.3.2 Estatística $P(s)$

Como foi dito acima, através da estatística $P(s)$ os espaçamentos entre os níveis sucessivos e_{i+1} e e_i podem ser plotados como um histograma. Para sistemas integráveis o histograma se aproxima da distribuição de Poisson:

$$P(s) = e^{-s}. \quad (2.8)$$

Esta distribuição é obtida quando a posição de dois níveis de energia sucessivos não são correlacionados. Neste caso não acontece o fenômeno da repulsão entre os níveis de energia e temos um grande número de espaçamento de níveis próximo à origem (observe a figura 2.2).

No caso de um sistema caótico a estatística $P(s)$ se aproxima da distribuição obtida pela Teoria das Matrizes Randômicas, apresentada anteriormente (observe a curva GOE na figura 2.2). Observamos neste caso que existe uma repulsão entre os níveis de energia. Em contraste com os sistemas integráveis a distribuição mostra poucos níveis a pequenas distâncias, demonstrando que os autovalores tendem a se repelir uns aos outros.

2.3.3 Estatística $\overline{\Delta_3}$

Define-se a estatística $\overline{\Delta_3}$, introduzida por Dyson e Mehta [27], como uma medida de quão bem qualquer extensão do espectro, de comprimento L , pode ser aproximada por uma reta:

$$\overline{\Delta_3}(L) = \frac{1}{j_{max}} \sum_{j=1}^{j_{max}} \Delta_3(z_j, L), \quad (2.9)$$

com

$$\Delta_3(z_j, L) = \min_{A_j, B_j} \frac{1}{L} \int_{z_j - \frac{L}{2}}^{z_j + \frac{L}{2}} [N(x) - A_j x - B_j]^2 dx, \quad (2.10)$$

onde $N(x)$ é o espectro desdobrado. O centro do intervalo L é em z_j . Uma vez que $\Delta_3(z_j, L)$ depende fortemente de z_j , a média é feita sobre um grande número de tais intervalos, contidos entre o maior e o menor autovalor x_1 e x_n .

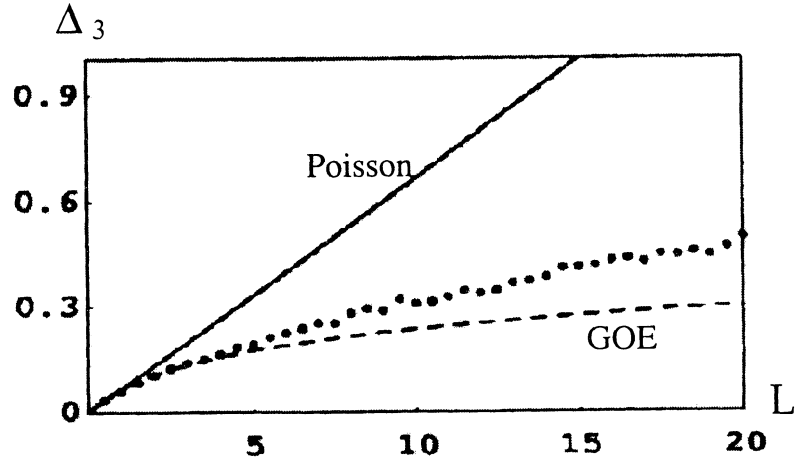


Figura 2.4: Estatística $\overline{\Delta}_3$. Os pontos são relativos ao espectro de níveis de energia do sistema. Figura extraída [13].

Em sistemas quânticos cujo análogo clássico é caótico, a estatística $\overline{\Delta}_3$ tem a forma aproximada [28] ($L \gg 1$):

$$\overline{\Delta}_3 = \frac{1}{\pi^2}(L - 0,0687). \quad (2.11)$$

Em sistemas quânticos cujo análogo clássico é integrável, a função $\overline{\Delta}_3(z_j, L)$ tem a seguinte forma:

$$\overline{\Delta}_3 = \frac{L}{15}. \quad (2.12)$$

Observe a figura 2.4.

2.3.4 Cicatrizes

Ainda sobre a caracterização de caos em sistemas quânticos podemos citar um fenômeno que ocorre em determinados autoestados de um sistema caótico. Heller [29] apresentou em 1984 o que chamou de cicatrizes. Ele demonstrou que é possível que a função de onda seja mais intensa justamente sobre as regiões do espaço de configuração onde haveria órbitas periódicas instáveis do sistema clássico correspondente. Podemos observar um exemplo na figura 2.5.

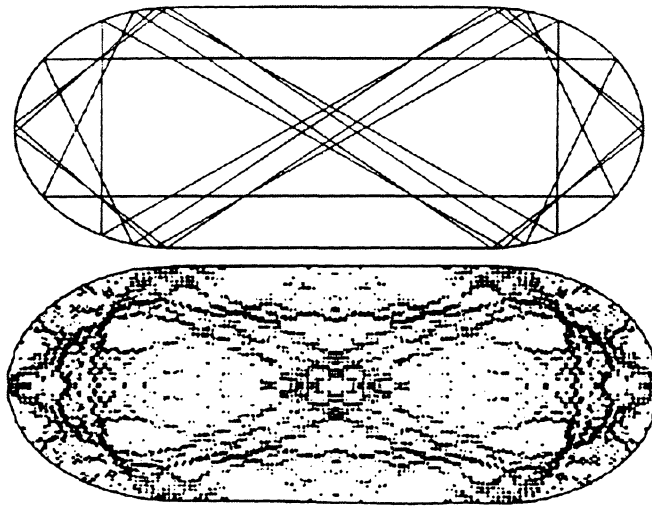


Figura 2.5: Na figura superior: órbita clássica altamente instável; na inferior: um autoestado deste mesmo sistema quantizado. Figura extraída de [43].

2.3.5 Caos ondulatório

Citamos na introdução que o termo “caos quântico” é entendido como a descrição quântica de sistemas clássicos caóticos. No entanto, precisamos chamar a atenção para um ponto que está em contraste ao que foi mencionado em relação a esta definição, que é a recente descoberta do chamado caos ondulatório [16, 30]. No caos ondulatório as características de caos quânticos surgem para classes de sistemas cujos análogos clássicos não apresentam caos. Diferentes mecanismos tem sido propostos para explicar sua origem, mas o certo é que as características ondulatórias das partículas

quânticas, que dão origem ao tunelamento e ao espalhamento estão intimamente relacionadas a este fenômeno. Os métodos de caracterização de caos ondulatório são os já mencionados para o caos quântico “usual”. Uma diferença, entretanto, é que talvez não haja mais sentido em falar em cicatrizes, uma vez que o análogo clássico não é caótico, mas este é um ponto ainda em aberto.

Capítulo 3

Bilhares

Um bilhar clássico consiste de uma partícula puntiforme que se move livremente num domínio compacto de um espaço d -dimensional, a qual é refletida elasticamente pelas fronteiras deste domínio. Nos restringimos a $d = 2$. No caso de bilhares clássicos consideramos as órbitas que a partícula descreve dentro deste ao colidir elasticamente com as paredes. Exemplos de órbitas clássicas podem ser vistos na figura 3.1.

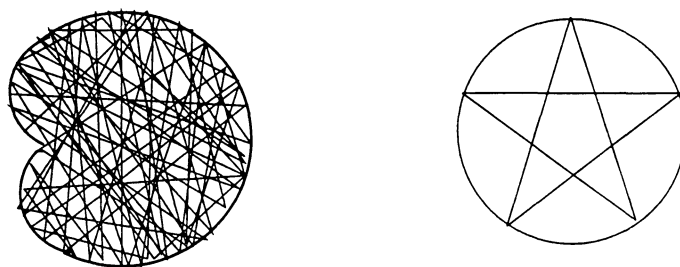


Figura 3.1: Órbitas caóticas no bilhar *Pascalian snail*. À direita órbita periódica no bilhar circular.

Exemplos de bilhares integráveis são fornecidos pelo círculo e pela elipse. Entre os muitos exemplos de bilhares caóticos, dois têm recebido particular atenção, o bilhar Sinai que consiste de um quadrado com um círculo no seu interior (a partícula se move no domínio entre o quadrado e o círculo) e o estádio Bunimovich, que é de forma oval e consiste de duas seções paralelas igualmente retas que são unidas por dois semi-círculos, como mostra a figura 3.2. No bilhar Sinai o caos é

devido ao efeito de desajustamento da reflexão no círculo em seu interior. No estádio Bunimovich surge caos porque as linhas retas destroem a invariância de rotação dos dois semi-círculos. Alternativamente, a dinâmica caótica pode ser atribuída a um efeito singular de mudança em sua geometria. Sinai e Bunimovich [31, 32, 33] mostraram que ambos bilhares são completamente caóticos e pertencem a classe de Bernoulli, isto é, os sistemas dinâmicos que apresentam caos forte.

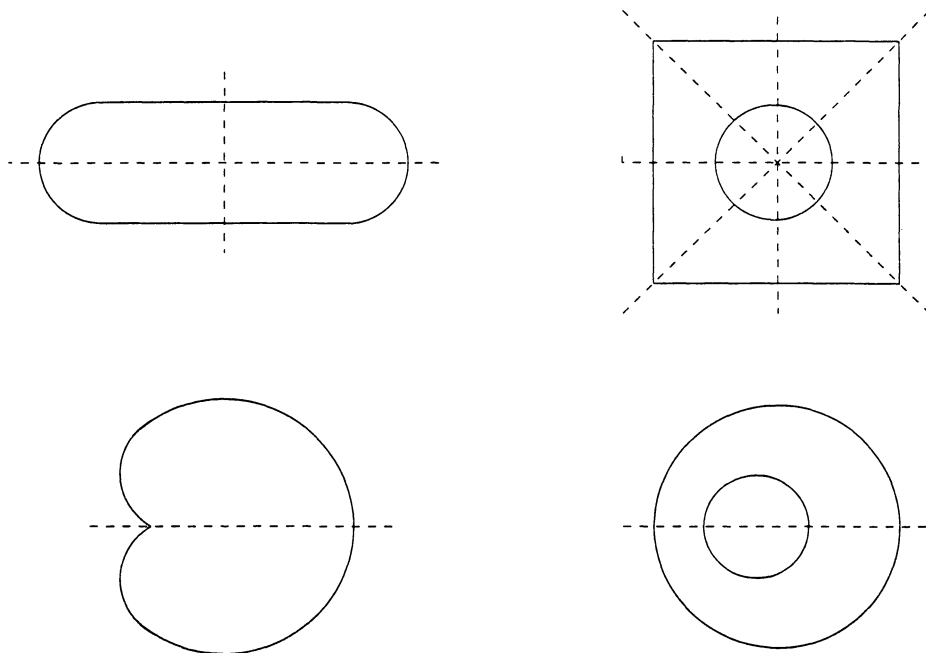


Figura 3.2: Quatro importantes bilhares: o estádio Bunimovich (no alto à esquerda), o bilhar Sinai (no alto à direita), o *Pascalian snail* (em baixo à esquerda) e o bilhar anular (em baixo à direita). Para reduzir as simetrias estes bilhares devem ser cortados ao longo dos eixos de simetrias, que estão desenhados como linhas pontilhadas.

O análogo quântico do bilhar clássico é descrito pela equação de Schrödinger estacionária com as condições de contorno de Dirichlet (a função de onda desaparece nas fronteiras). Os níveis de energia do sistema são calculados pela diagonalização da matriz do Hamiltoniano. Focalizamos nossa atenção nas propriedades de flutuações espectrais dos bilhares quânticos. Em contraste com a densidade de níveis, estas propriedades dependem sensivelmente da forma da fronteira. Para analisar as flutuações espectrais é importante usar apenas níveis que pertençam ao mesmo conjunto de números quânticos. Isto é feito removendo-se as simetrias do problema, como foi explicado na seção 2.2.

McDonald e Kaufman [34] investigaram numericamente o espectro dos níveis de energia do círculo, um sistema classicamente integrável. Os resultados da distribuição de espaçamentos, estatística $P(s)$, são mostrados na figura 3.3 (a). Acúmulo de níveis e degenerescências devido a ausência de repulsão de níveis podem claramente ser vistas. Temos um grande número de espaçamentos próximo a origem e o histograma concorda bem com a distribuição de Poisson.

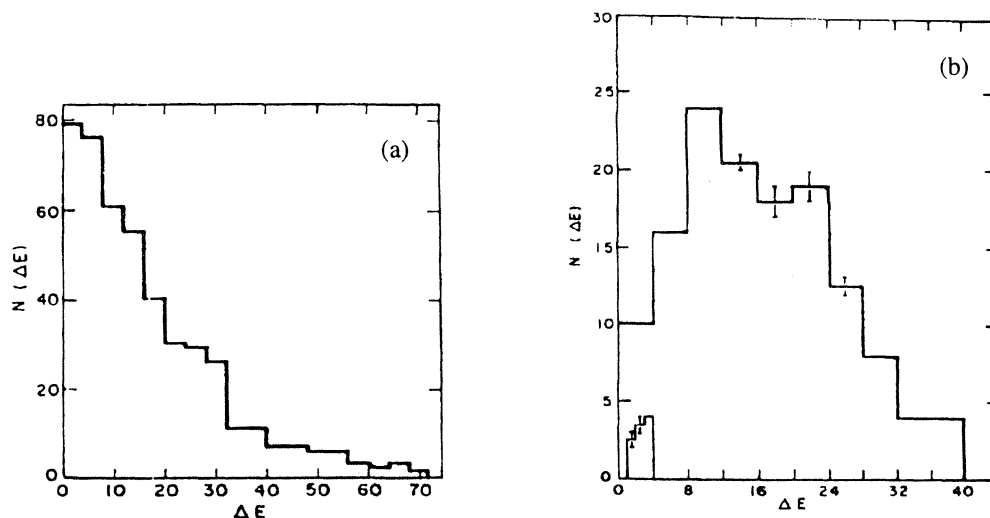


Figura 3.3: Distribuição do espaçamento dos vizinhos próximos de níveis de paridade ímpar no círculo (a) e do estádio Bunimovich (b).

Bilhares caóticos se comportam bem diferente. Em seu trabalho pioneiro de 1979, McDonald e Kaufman [34] calcularam numericamente as autoenergias e autofunções do bilhar Bunimovich. Eles mostraram que a distribuição dos espaçamentos é do tipo Wigner e acentuaram a diferença qualitativa com a distribuição dos espaçamentos do círculo, calculado no mesmo artigo, figura 3.3 (b). McDonald e Kaufman [34] atribuíram esta diferença a integrabilidade ou não-integrabilidade clássica dos dois casos. Eles também observaram que as linhas das autofunções no estádio Bunimovich não se cruzam. Este fenômeno está relacionado com a repulsão dos níveis de energia e será discutido na seção 7.3 do capítulo 7.

O primeiro estudo realizado da transição do espectro de flutuações num bilhar, de regular para caótico, é provavelmente devido a Robnik [35] em 1984. Através da variação de parâmetros definidos foi possível observar a transição do caso integrável para o caótico. Seu bilhar está relacionado com o *Pascalian snail*, que é um dos tipos de bilhar que apresentam caos, observe as figuras 3.1 e 3.2. O bilhar

anular, introduzido por Bohigas et al. [36], consiste da área entre dois círculos com diferentes raios, observe a figura 3.2. O bilhar é integrável apenas quando os círculos são concêntricos. As propriedades do sistema dependem de dois parâmetros, a razão entre os dois raios e a distância entre os dois centros. Basicamente, o caos surge nestes casos como consequência da geometria, ou condições de contorno, do bilhar.

Uma outra situação, bastante interessante e recente, é a possibilidade de encontrar caos em sistemas unidimensionais com poucas partículas interagentes. Van Vessen, et al [13] mostraram recentemente que um dos fatores relevantes para que um sistema quântico formado por duas partículas confinadas num bilhar unidimensional apresente características caóticas é existir uma razão diferente de um entre suas massas. Foram analisados sistemas onde as partículas interagem por potenciais de curto alcance, em particular por funções δ . Foram consideradas também situações onde havia potenciais externos, também dados por δ 's. Os parâmetros relevantes destes sistemas foram a relação entre as massas das partículas e a intensidade das interações. Também importantíssimo foram as condições de contorno escolhidas, periódicas (círculo) ou paredes infinitas (caixa). O aspecto dinâmico que gera a transferência de momento nos choques é regido pela razão entre as massas das partículas ser diferente de 1. Entretanto, dependendo das condições de contorno isto pode ser ou não realçado. Para a caixa o efeito é fortemente intensificado, gerando um intervalo enorme de possíveis valores para os momentos das partículas nos múltiplos espalhamentos. Assim, seguindo a idéia usual de que estados quânticos caóticos podem ser pensados como combinação linear de ondas planas aleatórias, então esta argumentação consegue explicar o comportamento caótico encontrado nesta situação.

Um análise clássica da distribuição dos vários momentos lineares, devido ao choque das partículas, em função das massas foi feita por Casati et al [15]. O comportamento dinâmico de um sistema unidimensional formado duas partículas, consideradas como esferas rígidas, é examinado do ponto de vista da quebra de ergodicidade do sistema. Quando a relação:

$$\eta = \frac{\theta}{\pi}, \quad (3.1)$$

onde

$$\cos(\theta) = \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma}. \quad (3.2)$$

e γ é a razão entre as massas das partículas, é satisfeita, mostrou-se [15] que o sistema clássico unidimensional pode ser integrável ou não dependendo do valor de η . Observou-se que quando a razão entre as massas (γ) é tal que η é um número racional o sistema é integrável e o sistema é caótico quando η é um número irracional. Este comportamento, em função das massas, foi também observado nos sistemas quânticos unidimensionais com duas partículas interagentes [13], citado acima.

Capítulo 4

Partícula livre no bilhar

Faremos neste capítulo uma revisão de alguns casos existentes na literatura. Apresentamos a solução dos problemas de uma e duas partículas livres confinadas no círculo [14]. A solução para o caso de uma partícula confinada servirá de base para o segundo caso, de duas partículas confinadas sem interação. O resultado deste segundo caso será utilizado, por sua vez, como base para o problema que discutimos neste trabalho, o bilhar circular com duas partículas interagentes.

4.1 Primeiro caso: Uma partícula

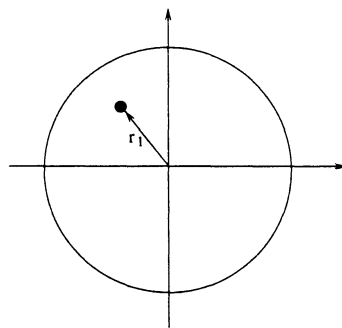


Figura 4.1: Uma partícula livre no bilhar circular.

Consideramos primeiro o caso de uma partícula confinada num círculo. O Hamiltoniano é dado pela expressão:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}, \quad (4.1)$$

onde μ é a massa da partícula.

Podemos obter uma solução analítica para este problema resolvendo a Equação de Schrödinger Independente do Tempo em coordenadas polares. Temos então $\psi(\vec{x}) = \psi(r, \theta)$

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(r, \theta) = E \psi(r, \theta). \quad (4.2)$$

$$\nabla^2 \psi(r, \theta) = \frac{-2\mu E}{\hbar^2} \psi(r, \theta). \quad (4.3)$$

Fazendo $k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$ e passando tudo para o primeiro membro da igualdade temos:

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(r, \theta) = 0. \quad (4.4)$$

Escrevendo ∇^2 em coordenadas polares e substituindo na equação 4.4, temos:

$$\frac{\partial^2 \psi(r, \theta)}{\partial r^2} + \frac{\partial \psi(r, \theta)}{r \partial r} + \frac{\partial^2 \psi(r, \theta)}{r^2 \partial \theta^2} + k^2 \psi(r, \theta) = 0. \quad (4.5)$$

Usando o método da separação de variáveis, fazemos $\psi(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$. A equação 4.5 fica então:

$$\Theta(\theta) \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{\Theta(\theta)}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{R(r)}{r^2} \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} = -k^2 R(r)\Theta(\theta). \quad (4.6)$$

Dividindo por $R(r)\Theta(\theta)$ temos:

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{1}{r R(r)} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{1}{r^2 \Theta(\theta)} \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} = -k^2. \quad (4.7)$$

Multiplicando os dois lados da igualdade por $\frac{r^2}{k^2}$ chegamos a separação das variáveis r e θ .

$$r^2 k^2 + \frac{r^2}{R(r)} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{r}{R(r)} \frac{dR(r)}{dr} = -\frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2}. \quad (4.8)$$

Para que esta igualdade seja verdadeira cada membro da equação deve ser igual a um valor constante que chamaremos de m^2 .

$$-\frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} = m^2, \quad (4.9)$$

$$r^2 k^2 + \frac{r^2}{R(r)} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{r}{R(r)} \frac{dR(r)}{dr} = m^2. \quad (4.10)$$

Resolvendo a equação 4.9 temos:

$$\frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} = -m^2 \Theta(\theta), \quad (4.11)$$

$$\Theta(\theta) = e^{\pm im\theta}, \quad (4.12)$$

impondo que

$$\Theta(\theta) = \Theta(\theta + 2\pi), \quad (4.13)$$

temos que m é um número inteiro.

Encontramos a solução para a parte angular do problema, portanto o número quântico m está relacionado ao momento angular da partícula.

Para a equação radial 4.10 multiplicamos por $R(r)$ os dois lados da igualdade e em seguida fazemos $R(r) = y$ e $r = x$

$$yx^2 k^2 + x^2 y'' + xy' - ym^2 = 0. \quad (4.14)$$

Fazendo a substituição de variáveis $kx = z$, temos que $y' = \frac{dy}{dz} k$, e chegamos a função de Bessel:

$$z^2 y'' + zy' + (z^2 - m^2)y = 0, \quad (4.15)$$

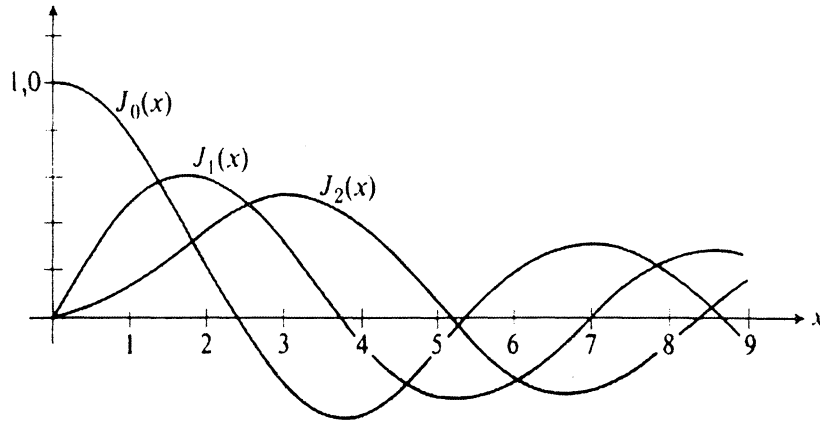


Figura 4.2: Funções de Bessel. Figura extraída de [41].

que tem como solução: $J_m(z) = J_m(kx)$, onde:

$$J_m(kx) = (kx)^m \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (kx)^{2n}}{2^{2n+m} n! (n+m)!}. \quad (4.16)$$

Observe na figura 4.2 a representação gráfica da função de Bessel.

Finalmente a função de onda para uma partícula será:

$$\psi(r, \theta) = J_m(kr) e^{\pm im\theta}. \quad (4.17)$$

Condições de Contorno em r :

Temos que a partícula está confinada dentro de um círculo de raio r_0 , logo a função de onda deve se anular na fronteira deste círculo.

$$\Psi(r = r_0, \theta) = 0, \text{ Dirichlet} \quad (4.18)$$

o que implica que

$$J_m(kr_0) = 0. \quad (4.19)$$

Representamos as raízes não triviais [41] de $J_m(kr_0)$ por α_{mn} . Os valores dos k 's apropriados para esta condição de Dirichlet são:

$$k_{mn} = \frac{\alpha_{mn}}{r_0} \quad (m = 0, 1, 2, 3, \dots, n = 1, 2, 3, \dots), \quad (4.20)$$

onde n é o número quântico radial e implica na quantização da energia dada por:

$$k_{mn} = \sqrt{\frac{2\mu E_{mn}}{\hbar^2}}. \quad (4.21)$$

A função de onda para uma partícula no bilhar circular é então:

$$\psi_{mn}(r, \theta) = A_{mn} J_m(k_{mn} r) e^{\pm im\theta}, \quad (4.22)$$

onde A_{mn} é a constante de normalização e os índices m e n são relativos ao momento angular e à energia da partícula, respectivamente.

Note que para cada momento angular m , temos vários zeros, ou seja, vários n 's (veja figura 4.2) que satisfazem a equação 4.19.

Da condição de normalização temos então que:

$$\int \int \psi_{mn}^* \psi_{mn} r dr d\theta = 1, \quad (4.23)$$

$$\int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{r_0} r dr |A|^2 J_m(k_{mn} r) e^{im\theta} J_m(k_{mn} r) e^{-im\theta} = 1, \quad (4.24)$$

$$|A|^2 2\pi \int_0^{r_0} r [J_m(k_{mn} r)]^2 dr = 1. \quad (4.25)$$

Utilizando a integral de normalização [41] chegamos ao resultado final:

$$A_{mn} = \frac{1}{r_0 \sqrt{\pi} J_{m+1}(k_{mn} r_0)}. \quad (4.26)$$

4.2 Segundo caso: Duas partículas sem interação

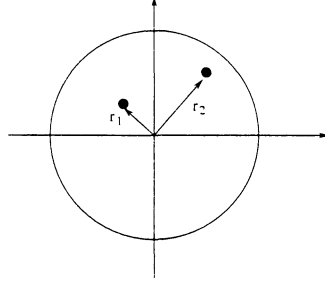


Figura 4.3: Duas partículas livres no bilhar circular.

Temos neste caso duas partículas confinadas simultaneamente no bilhar circular, sem interação entre elas. Consideramos as partículas distinguíveis para este caso como também para o caso com interação, que será visto no próximo capítulo. O Hamiltoniano do sistema é dado pela expressão:

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2\mu_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2\mu_2}, \quad (4.27)$$

onde μ_1 é a massa da partícula 1 e μ_2 é a massa da partícula 2.

A solução analítica para este caso é então o produto das soluções do caso anterior:

$$\Psi_{i_1 i_2}(r_1, \theta_1, r_2, \theta_2) = \psi_{m_1 n_1}(r_1, \theta_1) \psi_{m_2 n_2}(r_2, \theta_2), \quad (4.28)$$

onde os índices $m_1 n_1$ e $m_2 n_2$, das funções de onda das partículas 1 e 2, foram substituídos por i_1 e i_2 na solução do sistema.

Este caso é importante pois, introduzindo a notação de Dirac, $|\Psi_{i_1 i_2}\rangle$ serão os vetores que usaremos como base para expandir o caso interagente. Através de cálculos numéricos montaremos a representação matricial do Hamiltoniano e através da diagonalização da matriz os autovalores, ou seja, os níveis de energia, serão obtidos. Este é um método padrão, encontrado em livros texto [28], sendo muito usado e com grande utilidade em diversas situações [37].

Para simplificar a notação não escreveremos explicitamente a constante de normalização para as partículas 1 e 2. Os números quânticos $(m_1, n_1$ e $m_2, n_2)$ das constantes A_1 e A_2 serão também indicados simplesmente pelo índice correspondente a cada partícula. Desta forma as funções de onda para as partículas 1 e 2, respectivamente, serão:

$$\psi_{m_1 n_1}(r_1, \theta_1) = A_1 J_{m_1}(k_{m_1 n_1} r_1) e^{\pm i m_1 \theta_1}, \quad (4.29)$$

$$\psi_{m_2 n_2}(r_2, \theta_2) = A_2 J_{m_2}(k_{m_2 n_2} r_2) e^{\pm i m_2 \theta_2}. \quad (4.30)$$

Capítulo 5

Duas partículas interagentes no bilhar

Consideramos finalmente as duas partículas interagindo dentro do bilhar. Para este problema não temos como resolver a Equação de Schrödinger analiticamente. Estamos interessados em encontrar os níveis de energia do sistema, e para isso montamos a representação matricial do Hamiltoniano e diagonalizamos para obter os autovalores de energia.

O Hamiltoniano deste sistema será composto pelo termo das partículas livres (H_0) e pelo termo do potencial (V)

$$H = H_0 + V, \quad (5.1)$$

onde

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2\mu_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2\mu_2}, \quad (5.2)$$

e

$$V = V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{r}, \quad (5.3)$$

onde $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$.

O potencial utilizado é conhecido na literatura como potencial de Yukawa. A motivação física para escolhermos um potencial do tipo Yukawa vem, entre outros fatores,

do fato de termos um parâmetro de alcance bem definido neste potencial (parâmetro α). Temos também o parâmetro V_0 , que nos permite variar a intensidade da interação entre as partículas. Um exemplo deste potencial modelando interações entre elétrons confinados pode ser visto em [38], onde L. G. G. Dias da Silva e M. A. M. de Aguiar consideraram o problema de dois elétrons interagentes confinados em um bilhar quadrado sujeitos a um campo magnético ortogonal.

Como foi dito anteriormente, precisamos calcular os **elementos de matriz do Hamiltoniano**:

$$H_{ij} = \langle \Psi_{i_1 i_2} | H | \Psi_{j_1 j_2} \rangle. \quad (5.4)$$

$$H_{ij} = \langle \Psi_{i_1 i_2} | H_0 | \Psi_{j_1 j_2} \rangle + \langle \Psi_{i_1 i_2} | V | \Psi_{j_1 j_2} \rangle, \quad (5.5)$$

onde

$$\Psi_{i_1 i_2} = \psi_{m_1 n_1} \psi_{m_2 n_2}, \quad (5.6)$$

e

$$\Psi_{j_1 j_2} = \psi_{q_1 l_1} \psi_{q_2 l_2}, \quad (5.7)$$

onde os índices m_1, n_1, m_2 e n_2 foram mudados para q_1, l_1, q_2 e l_2 para representar um outro estado de energia.

Lembrando que estamos usando como base os autovetores do caso em que as duas partículas estão livres, podemos calcular com facilidade os elementos de matriz do termo H_0 :

$$\langle \Psi_{i_1 i_2} | H_0 | \Psi_{j_1 j_2} \rangle = (E_1 + E_2) \delta_{i_1 j_1} \delta_{i_2 j_2}. \quad (5.8)$$

O problema aqui é calcular os elementos de matriz do termo do Potencial, ou seja, $\langle \Psi_{i_1 i_2} | V | \Psi_{j_1 j_2} \rangle$.

Cálculo dos elementos da matriz:

Expandindo o termo do potencial na base de autovetores das partículas sem interação cada elemento de matriz é calculado seguindo a forma geral abaixo:

$$\begin{aligned}
& \langle \Psi_{i_1 i_2} | V | \Psi_{j_1 j_2} \rangle = \\
& = \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{r_0} r_1 dr_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \int_0^{r_0} r_2 dr_2 \int_0^{2\pi} A_1^* A_2^* \\
& \times J_{m_1}(k_{m_1 n_1} r_1) e^{-im_1 \theta_1} J_{m_2}(k_{m_2 n_2} r_2) e^{-im_2 \theta_2} \\
& \times \left[\frac{e^{-\alpha |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right] A_1 A_2 J_{q_1}(k_{q_1 l_1} r_1) e^{iq_1 \theta_1} J_{q_2}(k_{q_2 l_2} r_2) e^{iq_2 \theta_2}. \quad (5.9)
\end{aligned}$$

Vemos que o potencial acopla as coordenadas \mathbf{r}_1 e \mathbf{r}_2 de modo que a integração de 5.9 não é trivial. Vamos nos ater a princípio nas integrais que envolvem apenas a parte angular das coordenadas. Para visualizarmos melhor estas integrais agrupamos os termos em θ_1 e θ_2 :

$$\begin{aligned}
& |A_1|^2 |A_2|^2 \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{r_0} r_1 dr_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \int_0^{r_0} r_2 dr_2 J_{m_1}(k_{m_1 n_1} r_1) e^{i(q_1 - m_1) \theta_1} \\
& \times J_{m_2}(k_{m_2 n_2} r_2) e^{i(q_2 - m_2) \theta_2} \left[\frac{e^{-\alpha |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right] J_{q_1}(k_{q_1 l_1} r_1) J_{q_2}(k_{q_2 l_2} r_2). \quad (5.10)
\end{aligned}$$

Para simplificar os cálculos nas integrais em θ_1 e θ_2 , fazemos a mudança de variáveis a seguir:

$$\int d\theta_1 d\theta_2 \rightarrow \int d\theta_- d\theta_+, \quad (5.11)$$

$$\theta_- = \theta_1 - \theta_2, \quad (5.12)$$

$$\theta_+ = \theta_1 + \theta_2, \quad (5.13)$$

e portanto,

$$\theta_1 = \frac{\theta_+ + \theta_-}{2}, \quad (5.14)$$

$$\theta_2 = \frac{\theta_+ - \theta_-}{2}. \quad (5.15)$$

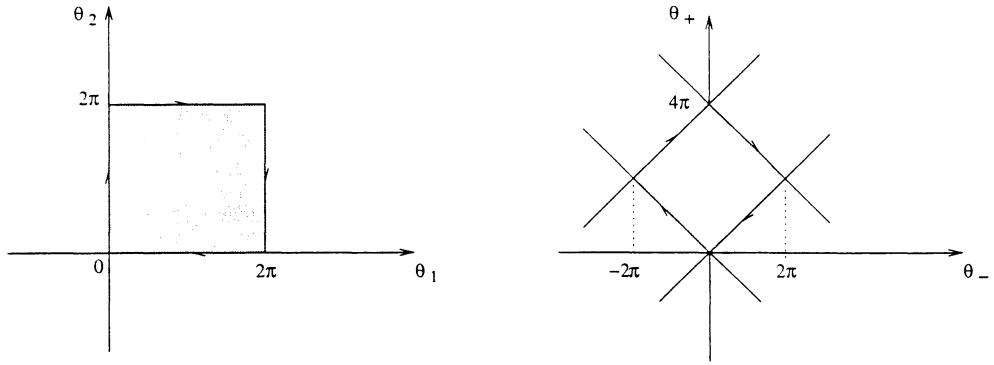


Figura 5.1: Transformação das coordenadas: $(\theta_1, \theta_2) \rightarrow (\theta_+, \theta_-)$ com os limites de integração.

Os novos limites de integração compreendem duas áreas triangulares, uma à direita e a outra à esquerda do eixo vertical (veja a figura 5.1). Para termos a integração completa precisamos então trabalhar em cada um destes limites e somar as integrais. Desta forma temos:

$$\int d\theta_1 d\theta_2 \rightarrow \frac{1}{2} \int_{-2\pi}^0 d\theta_- \int_{-\theta_-}^{4\pi+\theta_-} d\theta_+ + \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\theta_- \int_{\theta_-}^{4\pi-\theta_-} d\theta_+. \quad (5.16)$$

Ainda para simplificar o termo das exponenciais em θ_1 e θ_2 fazemos também:

$$\begin{aligned} a &= q_1 - m_1, \\ b &= q_2 - m_2. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Onde m_1 e q_1 são os números quânticos relativos ao momento angular da partícula 1 antes e depois do choque, respectivamente, e m_2 e q_2 os da partícula 2.

Escrevendo explicitamente a dependência do Potencial na parte angular temos:

$$V = V_0 \frac{e^{-\alpha \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_-}}}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_-}}, \quad (5.18)$$

pois

$$|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_-}. \quad (5.19)$$

Após as substituições citadas acima, a parte angular, sem considerar a constante de normalização, fica então:

$$I = \int_{-2\pi}^0 d\theta_- \int_{-\theta_-}^{4\pi+\theta_-} d\theta_+ e^{i\frac{a-b}{2}\theta_-} e^{i\frac{a+b}{2}\theta_+} F(\cos \theta_-) + \int_0^{2\pi} d\theta_- \int_{\theta_-}^{4\pi-\theta_-} d\theta_+ e^{i\frac{a-b}{2}\theta_-} e^{i\frac{a+b}{2}\theta_+} F(\cos \theta_-), \quad (5.20)$$

onde

$$F(\cos \theta_-) = \frac{e^{-\alpha |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad (5.21)$$

Observamos que os valores de a e b , como mostra a equação 5.17, estão relacionados aos números quânticos m e q . Também notamos que a integração em θ_+ envolve apenas uma exponencial. É interessante então que investiguemos como se comporta a integral para os casos em que $a + b \neq 0$ e $a + b = 0$.

Primeiro caso: $a + b (q_1 + q_2 - m_1 - m_2) \neq 0$

Após a integração em θ_+ na equação 5.20 temos:

$$I = \int_{-2\pi}^0 d\theta_- F(\cos \theta_-) e^{i\frac{a-b}{2}\theta_-} \frac{2}{i(a+b)} [e^{i\frac{a-b}{2}\theta_-} - e^{-i\frac{a+b}{2}\theta_-}] \\ + \int_0^{2\pi} d\theta_- F(\cos \theta_-) e^{i\frac{a-b}{2}\theta_-} \frac{2}{i(a+b)} [e^{-i\frac{a+b}{2}\theta_-} - e^{i\frac{a+b}{2}\theta_-}]. \quad (5.22)$$

Aplicando a propriedade distributiva e multiplicando as exponenciais em θ_- temos:

$$I = \int_{-2\pi}^0 d\theta_- \frac{2F(\cos \theta_-)}{i(a+b)} [e^{ia\theta_-} - e^{-ib\theta_-}] \\ + \int_0^{2\pi} d\theta_- \frac{2F(\cos \theta_-)}{i(a+b)} [e^{-ib\theta_-} - e^{ia\theta_-}]. \quad (5.23)$$

Usando que:

$$\int_{-2\pi}^0 d\theta_- \frac{2F(\cos \theta_-)}{i(a+b)} [e^{ia\theta_-} - e^{-ib\theta_-}] \\ = \int_0^{2\pi} d\theta_- \frac{2F(\cos \theta_-)}{i(a+b)} [e^{-ia\theta_-} - e^{ib\theta_-}]. \quad (5.24)$$

Chegamos a:

$$I = \frac{-4}{a+b} \int_0^{2\pi} d\theta_- F(\cos \theta_-) [\sin(b\theta_-) + \sin(a\theta_-)] = 0. \quad (5.25)$$

Temos que $F(\cos \theta_-)$ é uma função par de θ_- com o ponto médio em $\theta_- = \pi$. Por outro lado $\sin(a\theta_-)$, para a inteiro, é função ímpar de θ_- com ponto médio em $\theta_- = \pi$, o que demonstra termos $I = 0$.

Segundo caso: $a + b (q_1 + q_2 - m_1 - m_2) = 0$

Neste caso a equação 5.20 se torna mais simples e após a integração em θ_+ temos:

$$I = \int_{-2\pi}^0 d\theta_- F(\cos \theta_-) e^{ia\theta_-} [(4\pi + \theta_-) - (-\theta_-)] \\ + \int_0^{2\pi} d\theta_- F(\cos \theta_-) e^{ia\theta_-} [(4\pi - \theta_-) - (\theta_-)]. \quad (5.26)$$

Usando novamente a igualdade 5.23, chegamos a forma:

$$I = \int_0^{2\pi} d\theta_- F(\cos \theta_-) (4\pi - 2\theta_-) 2 \cos(a\theta_-). \quad (5.27)$$

Esta integral não é necessariamente nula.

Resumindo:

Os resultados acima podem ser sumarizados da seguinte forma:

$$a + b \neq 0 \rightarrow I = 0$$

$$a + b = 0 \rightarrow I \text{ pode ser } \neq 0 \quad (5.28)$$

mas se $a + b = 0 \rightarrow (q_1 - m_1) + (q_2 - m_2) = 0$. Então $m_1 + m_2 = q_1 + q_2$, ou seja, o momento angular total antes do choque tem que ser igual ao momento angular total depois do choque.

Com estes resultados verificamos uma nova simetria no sistema. Observamos que somente quando os números quânticos m_1, m_2, q_1 e q_2 obedecem a relação anterior podemos ter um resultado diferente de zero para o elemento de matriz calculado. Identificamos assim mais uma quantidade conservada, o momento angular total. Desta forma, podemos montar a representação matricial do Hamiltoniano de modo que ele tenha a forma bloco-diagonal (veja figura 5.2). Cada bloco é referente a determinados números quânticos, que representam a conservação do momento angular. Assim ao diagonalizarmos a matriz podemos trabalhar em cada bloco separadamente.

Desta forma, podemos montar a representação matricial do Hamiltoniano de modo que ele tenha a forma bloco-diagonal (veja figura 5.2). Cada bloco é referente a determinados números quânticos, que representam a conservação do momento angular. Assim ao diagonalizarmos a matriz podemos trabalhar em cada bloco separadamente.

Cada bloco do Hamiltoniano matricial será construído, como foi dito acima, de acordo com a relação dos números quânticos que fornecem elementos de matriz não nulos. O primeiro bloco é referente ao momento angular total igual a zero, o segundo ao momento angular total igual a 1, e assim por diante. Como exemplo montamos na tabela 1 o bloco referente ao momento angular total igual a um e $n = 2$, ou seja, dois zeros da função de Bessel. Os índices representados na primeira coluna são relativos aos números quânticos m_1 , m_2 , n_1 e n_2 , enquanto que os índices representados na primeira linha se referem aos números quânticos q_1 , q_2 , l_1 e l_2 . Lembrando que os números quânticos m_1 e m_2 estão relacionados ao momento angular das partículas 1 e 2, respectivamente, a soma $m_1 + m_2$ representa o momento angular total e deve ser sempre igual a 1. O mesmo vale para q_1 e q_2 , que representam também o momento angular das partículas 1 e 2, respectivamente, num outro autoestado de H_0 .

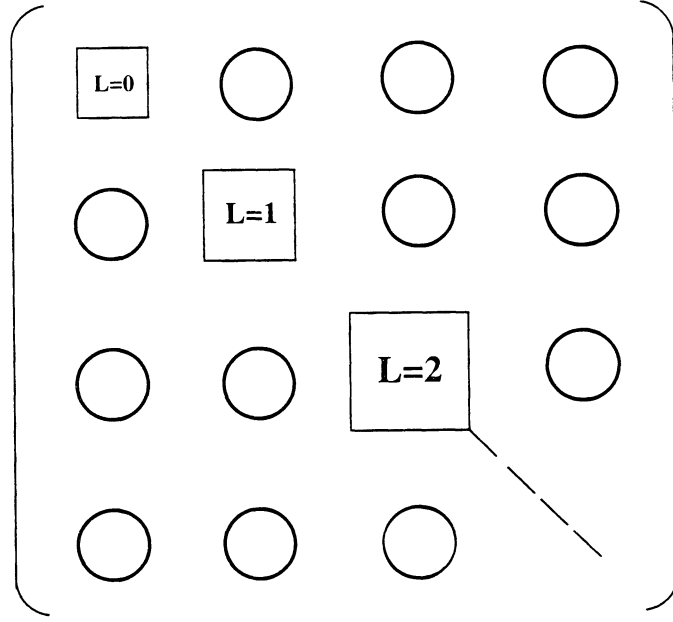


Figura 5.2: Representação matricial do Hamiltoniano do sistema composto pelas duas partículas interagentes.

Bloco do Hamiltoniano referente ao momento angular total igual a um e $n_{max} = 2$ (dois zeros da função de Bessel).

$m_1 \ m_2 \ n_1 \ n_2$				0111	0112	0121	0122	1011	1012	1021	1022
$q_1 \ q_2 \ l_1 \ l_2$											
0111				h_{11}	h_{12}	h_{13}	h_{14}	h_{15}	h_{16}	h_{17}	h_{18}
0112				h_{21}	h_{22}	h_{23}	h_{24}	h_{25}	h_{26}	h_{27}	h_{28}
0121				h_{31}	h_{32}	h_{33}	h_{34}	h_{35}	h_{36}	h_{37}	h_{38}
0122				h_{41}	h_{42}	h_{43}	h_{44}	h_{45}	h_{46}	h_{47}	h_{48}
1011				h_{51}	h_{52}	h_{53}	h_{54}	h_{55}	h_{56}	h_{57}	h_{58}
1012				h_{61}	h_{62}	h_{63}	h_{64}	h_{65}	h_{66}	h_{67}	h_{68}
1021				h_{71}	h_{72}	h_{73}	h_{74}	h_{75}	h_{76}	h_{77}	h_{78}
1022				h_{81}	h_{82}	h_{83}	h_{84}	h_{85}	h_{86}	h_{87}	h_{88}
				h_{91}	h_{92}	h_{93}	h_{94}	h_{95}	h_{96}	h_{97}	h_{98}

Capítulo 6

Procedimentos Numéricos

Como mostramos no capítulo 5, as integrais não puderam ser resolvidas analiticamente. Os resultados foram então obtidos por procedimento numérico. Neste capítulo serão apresentados alguns detalhes sobre este procedimento numérico. As rotinas para calcular os elementos da matriz (equação 5.9), assim como para diagonalizá-la, foram retiradas do Numerical Recipes [39].

Os cálculos numéricos referentes a montagem e diagonalização da matriz foram executados por um programa em Fortran77 com precisão dupla. Numericamente resolvemos integrais tridimensionais nas variáveis r_1 , r_2 e θ_{12} . Seguindo os cálculos analíticos do capítulo 5, estas integrais têm a forma da equação 5.27 incluindo as integrais em r_1 e r_2 . Estes cálculos foram realizados através da rotina quad3d que usa Quadraturas Gaussianas. A idéia deste método é que o programa pode escolher a localização das abscissas nas quais a função será calculada.

No cálculo dos elementos da matriz $\langle \Psi_{i_1 i_2} | V | \Psi_{j_1 j_2} \rangle$, temos o termo $\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ devido ao potencial de interação. Obviamente que a singularidade em $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$ pode introduzir erros numéricos que precisam ser evitados. Embora existam métodos analíticos de regularização de Hamiltonianos que tenham este tipo de singularidade [40], optamos aqui por um procedimento numérico bastante simples para evitá-la. Definimos os limites de integração de modo que a reta $r_1 = r_2$ ficasse fora da área integrada. Observe a figura 6.1. Sendo assim, utilizamos um elemento infinitesimal Δ para limitar as áreas I e II, de modo que a área total (AI + AII) não inclua esta

reta.

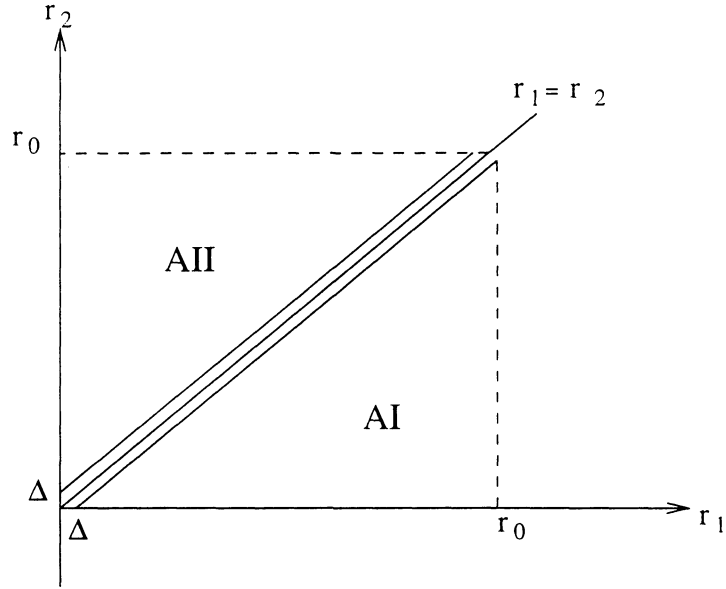


Figura 6.1: .

Temos então na Área I:

$$\int_{\Delta}^{r_0} dr_1 \int_0^{r_1 - \Delta} dr_2. \quad (6.1)$$

Integra-se r_1 de Δ a r_0 (tamanho do bilhar) e r_2 de 0 até $r_1 - \Delta$.

E na Area II:

$$\int_{\Delta}^{r_0} dr_2 \int_0^{r_1 - \Delta} dr_1. \quad (6.2)$$

Integra-se r_2 de Δ a r_0 (tamanho do circulo) e r_1 de 0 até $r_2 - \Delta$,

onde Δ é o elemento infinitesimal que separa as áreas I e II da reta $r_2 = r_1$.

Obviamente o resultado da integral dependerá do valor de Δ escolhido. Testamos o resultado das integrais para valores de Δ entre 1.0×10^{-6} e 1.0×10^{-8} e verificamos que os resultados não variam significativamente dentro da precisão que desejamos para os níveis de energia.

Uma vez que os elementos de matriz foram calculados pelas integrais, o programa dá início a diagonalização da matriz. O método utilizado foi o Jacobi para diagonalizar matrizes reais e simétricas. A diagonalização é feita por uma sequência de transformações de similaridade ortogonal, da forma $A \rightarrow Z^{-1}.A.Z$. Sucessivas transformações fazem com que os elementos fora da diagonal se tornem menores e menores, até que a matriz seja diagonal para a precisão da máquina.

Como a matriz tem a forma bloco-diagonal o programa monta e diagonaliza cada bloco por vez. Foi discutido nos capítulos 2 e 4 a importância de se separar os níveis de energia não correlacionados, referentes a diferentes números quânticos. Desta forma, diagonalizando-se cada bloco separadamente, foi possível utilizar os níveis de energia para fazer as estatísticas $\overline{\Delta}_3$ e $P(s)$ para cada simetria separadamente.

A ordem das matrizes calculadas pelo programa variou entre aproximadamente 1600 e 2500. Dependendo do valor assumido pelo momento angular total e do número de zeros em que truncávamos a função de Bessel, obtínhamos a ordem da matriz. Por exemplo, para $L = 0$ usávamos 40 zeros da função de Bessel, para $L = 1$ usávamos 30. A ordem da matriz era calculada da seguinte forma: $n_{max} \times n_{max} \times (L + 1)$, onde n_{max} é o número de zeros da função de Bessel e L o momento angular total das partículas.

Testamos a convergência dos níveis considerando estas diferentes ordens de matrizes. Desta forma, foi necessário comparar os autovalores obtidos em matrizes de diferentes ordens para verificar até que número de níveis eles tinham o mesmo valor. Observamos que quanto mais aumentávamos o valor do parâmetro V_0 , assim como o do parâmetro γ , um menor número de níveis convergiam. Para uma matriz de 1600, por exemplo, sendo $V_0 = 1,0$ e $\gamma = 1,0$, obtínhamos uma convergência dos níveis até o nível de número 1200 aproximadamente, considerando os 4 primeiros dígitos. Já para valores maiores de V_0 e de γ , obtínhamos um pequeno número (em torno de 60) de níveis com mesmo valor (que convergiam). Considerando

que as estatísticas $\overline{\Delta}_3$ e $P(s)$ são realizadas sobre um número de níveis em torno de 500, houve a necessidade de calcular matrizes de ordem de até 3600 para que ao compararmos com os autovalores de outra matriz de ordem 2500 obtivéssemos uma convergência de pelo menos os 400 primeiros níveis.

As estatísticas $\overline{\Delta}_3$ e $P(s)$ foram realizadas numericamente por um programa escrito no “Mathematica”. Este programa usa o arquivo de dados gerado pelo programa em Fortran, com a relação dos níveis de energia do sistema. Antes de calcular as estatísticas de níveis o programa faz o desdobramento (que foi explicado no capítulo 2) e então, utilizando este espectro desdobrado, ele realiza as estatísticas.

Capítulo 7

Resultados

Uma vez calculados os níveis de energia do sistema composto pelas duas partículas no bilhar, será apresentado na primeira parte deste capítulo uma análise estatística dos mesmos, assim como breves comentários sobre alguns casos especiais. Apresentaremos numa segunda parte alguns gráficos que demonstram a repulsão entre os níveis de energia quando a dinâmica é caótica. Usamos unidades atômicas para todos os parâmetros ($\mu_1 = \hbar = e = 1$).

Lembrando ainda as conclusões finais do capítulo 5, sabemos agora que temos mais uma quantidade conservada no sistema. Esta quantidade está associada aos números quânticos m e q que são relativos ao momento angular antes e depois do choque entre as partículas. Logo, o momento angular surgiu como mais uma simetria no sistema e nos permitiu montar o Hamiltoniano matricial de forma que a matriz ficasse bloco-diagonal. Desta forma, ao diagonalizarmos a matriz trabalhamos em cada bloco separadamente, relativos a diferentes valores do momento angular. Os níveis de energia do sistema foram calculados, diagonalizando-se cada bloco separadamente, o que nos levou a conhecer os níveis de energia para o momento angular total do sistema, que chamaremos de L , igual a 0, 1 e 2.

Neste trabalho consideramos o bilhar circular com raio igual a 1 ($r_0 = 1$). As partículas podem estar, portanto, separadas de uma distância igual 2. Antes de dar início aos resultados, é interessante então observar graficamente como se comporta o potencial de Yukawa (equação 5.3) sob a mudança de parâmetros que

fizemos ao longo do estudo. Variamos o parâmetro V_0 nos valores 1,0; 5,0 e 10 e α entre $5,0 \times 10^{-3}$; $5,0 \times 10^{-1}$; 1,0; 5,0 e 10. O parâmetro V_0 nos dá a intensidade do potencial e α nos dá o alcance da interação. Observe na figura 7.1 o comportamento do potencial para $V_0 = 1,0$. Os valores de r no eixo das abscissas correspondem a distância $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ entre as partículas 1 e 2. Para $V_0 = 5,0$ e $V_0 = 10$ teríamos os valores do eixo vertical multiplicados por 5 e por 10, respectivamente. Como iremos variar estes parâmetros muitas vezes ao longo do trabalho, e em certas situações de maneiras bem distintas, é interessante ressaltar que o parâmetro α tem uma relação inversamente proporcional ao alcance do potencial, ou seja, quanto maior for o valor assumido por α menor será o alcance do potencial.

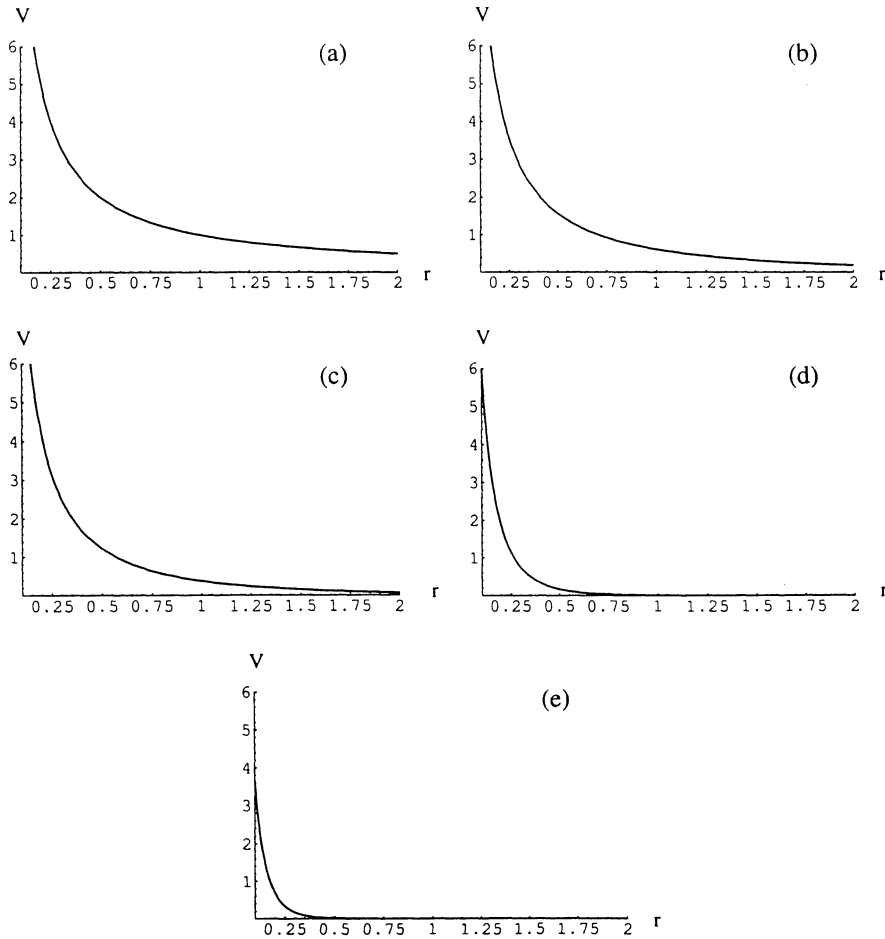


Figura 7.1: Pot. de Yukawa ($V = \frac{e^{-\alpha r}}{r}$) em função de r , para $V_0 = 1,0$. O parâmetro α assume os valores $5,0 \times 10^{-3}$; $5,0 \times 10^{-1}$; 1,0; 5,0 e 10, respectivamente nas figuras (a), (b), (c), (d) e (e).

Nos restringiremos então a princípio às estatísticas $P(s)$ e $\overline{\Delta_3}$ dos níveis de energia. Para isto introduzimos um novo parâmetro além daqueles já existentes no termo do potencial. Definimos o parâmetro γ como a razão $\frac{\mu_2}{\mu_1}$ entre as massas da partícula 2 e da partícula 1, com a finalidade de analisarmos como o sistema se comporta sob a variação desta razão (conforme discussão no final do capítulo 3). Quando usamos unidades atômicas, ou seja, $\mu_1 = \hbar = e = 1$, temos $\gamma = \mu_2$.

Após coletar dados de inúmeras combinações entre os três parâmetros V_0, α, γ , obtivemos alguns resultados que demonstram integrabilidade, alguns resultados que demonstram comportamento caótico e ainda alguns resultados que representam um comportamento intermediário entre os dois casos.

Ao calcularmos os níveis de energia através da diagonalização do Hamiltoniano matricial percebemos um problema de convergência entre os níveis calculados em tamanhos diferentes de matrizes, como foi detalhado no capítulo 6. Visando contornar este problema houve a necessidade de trabalhar com matrizes cada vez maiores para que tivéssemos um número razoável de níveis convergentes. Sendo assim, as estatísticas foram feitas com um número de níveis que varia entre 400 e 800 níveis, dependendo da convergência, como foi explicado anteriormente.

Para uma melhor explanação dos resultados obtidos o capítulo será dividido na seção 6.1, de resultados para massas iguais, e na seção 6.2, para massas diferentes.

7.1 Massas iguais

Como as massas são iguais, o parâmetro $\gamma = \frac{\mu_2}{\mu_1}$ é igual a 1 em todos os casos. Do ponto de vista clássico, quando as partículas têm massas iguais a dinâmica no bilhar se apresenta com menor complexibilidade, uma vez que as partículas simplesmente trocam de velocidades ao se chocarem. Não foi encontrado nenhuma combinação dos parâmetros V_0 (entre os valores 1,0; 5,0 e 10) e α (entre os valores $5,0 \times 10^{-3}$; $5,0 \times 10^{-1}$; 1,0; 5,0 e 10) que apresentasse um comportamento caótico do sistema para massas iguais. Apresentaremos a seguir, na seção 6.1.1, alguns resultados para momento angular total (L) igual a zero. Na seção 6.1.2 serão apresentados os resultados para $L = 1$ e $L = 2$.

7.1.1 $L = 0$

O que obtivemos para os níveis de energia do sistema com momento angular total igual a zero foram estatísticas que demonstram resultados integráveis como pode ser visto nas figuras 7.2 e 7.3. Na estatística da figura 7.2 usamos $V_0 = 5,0$ e variamos o alcance do potencial visando uma análise do que ocorre com a dinâmica do sistema. Lembramos aqui, que conforme foi mostrado no capítulo 2 (observe a figura 2.2), o sistema apresenta caos quando o histograma se aproxima da curva GOE. Na estatística $\overline{\Delta_3}$ o sistema apresenta caos quando os pontos que representam os dados do sistema se aproximam da curva abaixo e não da reta. Observe também no capítulo 2 a figura 2.4.

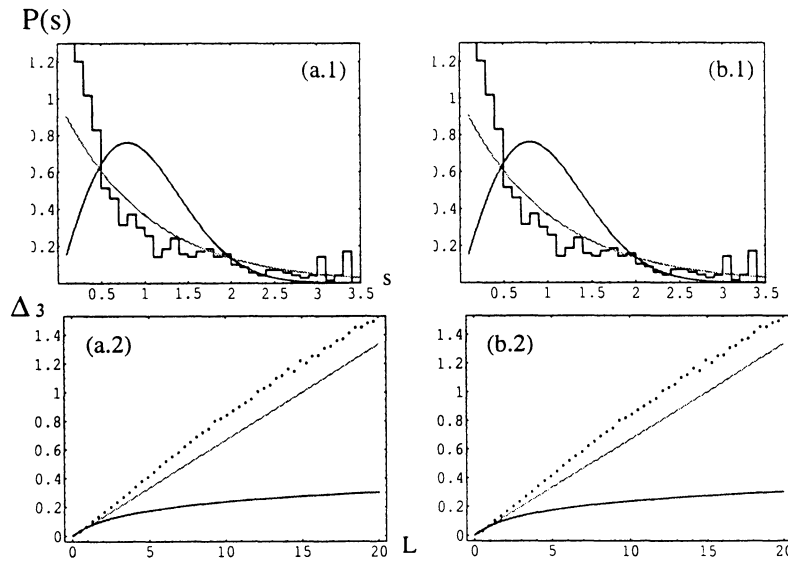


Figura 7.2: Estatísticas $P(s)$ nas figuras superiores e estatísticas $\overline{\Delta_3}$ nas inferiores, todas para $V_0 = 5,0$. Nas figuras (a.1) e (a.2) temos $\alpha = 1,0$. Em (b.1) e (b.2) temos $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$.

Na figura 7.3 temos $V_0 = 10$ e começamos dando o valor máximo ao parâmetro α ($\alpha = 10$) em (a.1) e (a.2). Nas figuras (b.1) e (b.2) fizemos $\alpha = 1,0$ e por fim aumentamos o alcance do potencial fazendo $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$ nas figuras (c.1) e (c.2). Observamos que para todos estes casos mostrados nas figuras, assim como para outras combinações de parâmetros que não apresentaremos no momento,

o sistema demonstra um comportamento que se aproxima do caso integrável.

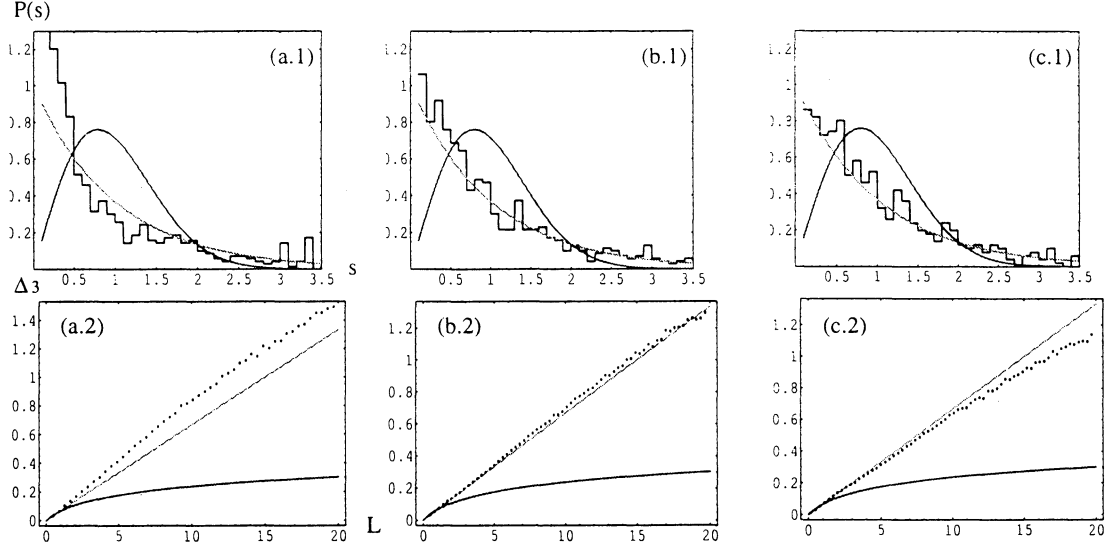


Figura 7.3: Estatísticas $P(s)$ nas figuras superiores e estatísticas $\overline{\Delta_3}$ nas inferiores, todas para $V_0 = 10$. Nas figuras (a.1) e (a.2) temos $\alpha = 10$. Em (b.1) e (b.2) temos $\alpha = 1,0$ e nas figuras (c.1) e (c.2) temos $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$.

Ainda para o sistema composto pelas partículas de massas iguais, o valor do parâmetro da intensidade da perturbação (V_0) foi sendo aumentado arbitrariamente, mantendo o parâmetro $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$ fixo (caso em que o potencial tem maior alcance). A figura 7.4 mostra as estatísticas para $V_0 = 30$ e $V_0 = 60$. Comparativamente aos resultados anteriores podemos perceber uma mudança nas estatísticas que demonstra um resultado aparentemente intermediário entre um sistema caótico e um sistema integrável.

Houve a tentativa de fazer as estatísticas para valores ainda maiores de V_0 ($V_0 = 100, 200, 800, \dots$) mas nestes casos o problema que foi citado anteriormente, da convergência dos níveis de energia, se tornava cada vez mais forte impossibilitando assim a confiabilidade dos resultados.

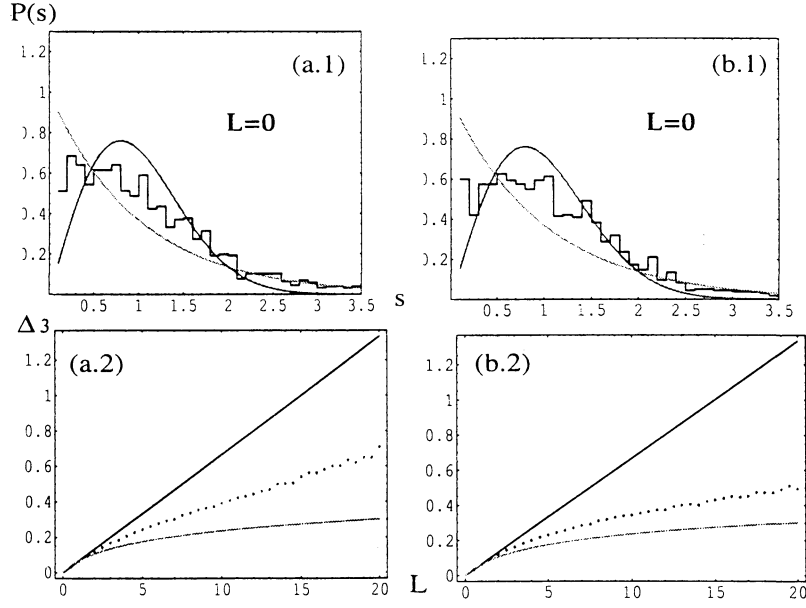


Figura 7.4: Estatísticas $P(s)$ nas figuras superiores e estatísticas $\overline{\Delta_3}$ nas inferiores, todas para $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$. Nas figuras (a.1) e (a.2) temos $V_0 = 30$. Em (b.1) e (b.2) temos $V_0 = 60$.

7.1.2 $L = 1$ e $L = 2$

Para o momento angular total igual a 1 e momento angular total igual a 2, os resultados são bastante semelhantes, o que demonstra que a variação de L unicamente, ou seja, não associado à variação de outros parâmetros, não interfere de forma relevante no tipo de dinâmica do sistema (regular, mista ou caótica). Por este motivo não serão apresentadas no momento muitas estatísticas, sendo algumas figuras relativas a estes casos discutidas apenas no fechamento do capítulo. Mostraremos apenas na figura 7.5 as estatísticas para $L = 1$ e $L = 2$, ambas para $V_0 = 30$ e $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$.

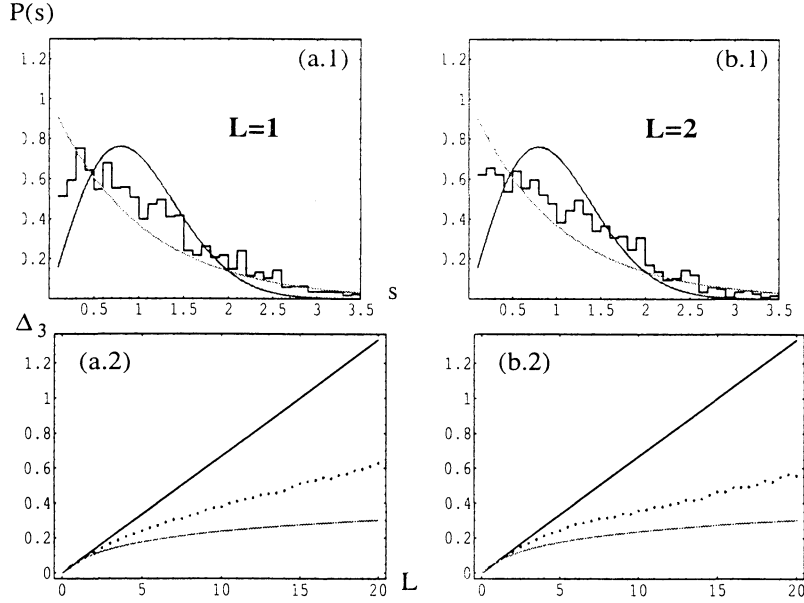


Figura 7.5: Estatísticas $P(s)$ nas figuras superiores e estatísticas $\overline{\Delta_3}$ nas inferiores, todas para $V_0 = 30$ e $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$. Nas figuras (a.1) e (a.2) temos $L = 1$ e nas figuras (a.2) e (b.2) temos $L = 2$.

7.2 Massas diferentes

Da mesma forma que foram apresentados os resultados para as partículas com massas iguais, começaremos com a seção 6.2.1 com resultados para momento angular total igual a zero ($L = 0$) e em seguida os resultados para $L = 1$ e $L = 2$ serão apresentados na seção 6.2.2.

Consideramos agora a estatística dos níveis para o caso em que as massas das partículas 1 e 2 são diferentes, ou seja, $\gamma = \frac{\mu_2}{\mu_1} \neq 1$. Usando argumentos clássicos, quando as massas das partículas são diferentes temos a dinâmica do sistema mais complexa. As partículas agora não trocam simplesmente de velocidade entre si, como no caso anterior. Considerando perfeitamente elásticas as colisões entre as partículas, suas velocidades após o choque podem assumir valores diferentes, conforme a sequência de choques entre elas mesmas e as paredes do bilhar. Espera-se então que no sistema quântico correspondente a dinâmica apresente também aspectos de maior complexibilidade. Como já foi comentado no capítulo 3, este tipo de

expectativa foi confirmada por Van Vessen, et al [13] ao mostrarem que um fator importante para o aparecimento de caos na dinâmica de um sistema formado por duas partículas num bilhar quântico unidimensional é a razão entre suas massas ser diferente de um, observando também as relações das equações 3.1 e 3.2.

7.2.1 $L = 0$

Em concordância com o que foi dito acima, no momento em que começamos a variar o parâmetro γ já obtivemos realmente uma alteração considerável nos resultados, ou seja, mesmo para pequenas diferenças entre as massas os resultados já indicam uma tendência do sistema para um comportamento caótico. Isto pode ser observado na figura 7.6 onde é possível comparar uma estatística realizada para um sistema de partículas de massas iguais com um outro no qual as partículas tem as massas ligeiramente diferentes.

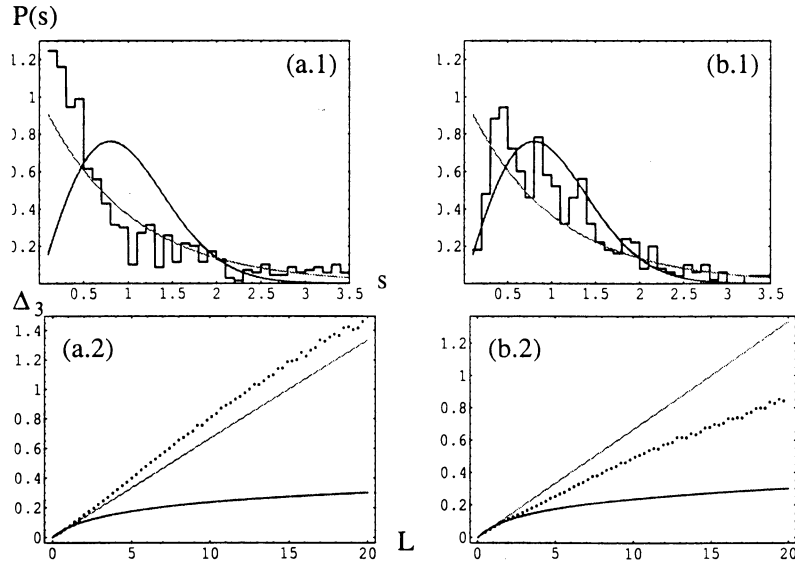


Figura 7.6: Estatísticas $P(s)$ nas figuras superiores e estatísticas $\overline{\Delta_3}$ nas inferiores, todas para $V_0 = 5, 0$ e $\alpha = 5, 0 \times 10^{-3}$. Nas figuras (a.1) e (a.2) temos $\gamma = 1, 0$. Em (b.1) e (b.2) $\gamma = 1, 1$.

Considerando então o sistema de partículas com massas diferentes temos neste caso 3 parâmetros (α , V_0 e γ) que serão variados ao longo do trabalho.

Para que os resultados sejam apresentados com mais clareza, os dividiremos em relação aos parâmetros que estão fixos.

Para $V_0 = 1,0$ e $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$ temos uma pequena intensidade do potencial mas um grande alcance. Ao variarmos o parâmetro γ nos valores 1,3; 2,0 e 15 obtivemos os resultados mostrados na figura 7.7.

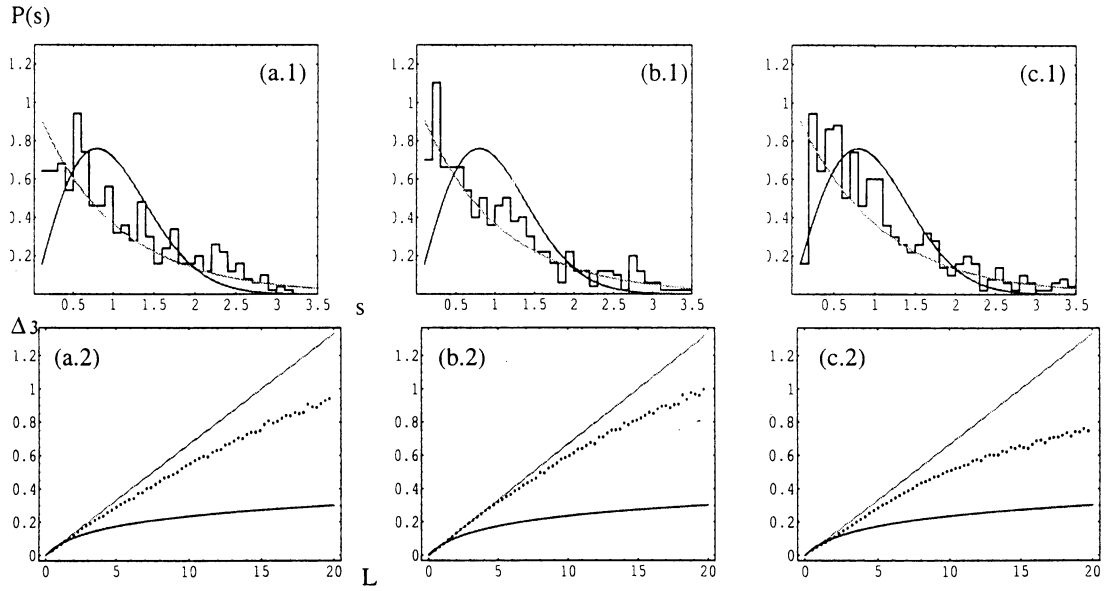


Figura 7.7: Estatísticas $P(s)$ nas figuras superiores e estatísticas $\overline{\Delta_3}$ nas inferiores, todas para $V_0 = 1,0$ e $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$. Nas figuras (a.1) e (a.2) temos $\gamma = 1,3$. Em (b.1) e (b.2) temos $\gamma = 2,0$. Em (c.1) e (c.2) temos $\gamma = 15$.

Para $V_0 = 5,0$ e $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$ temos uma maior intensidade do potencial e um longo alcance. Novamente ao variarmos o parâmetro γ nos valores 1,3; 2,0 e 15, obtemos os resultados mostrados na figura 7.8. Para estes três valores da razão entre as massas das partículas podemos observar nas estatísticas que os pontos se aproximam cada vez mais das curvas que representam caos, conforme variamos o parâmetro γ em ordem crescente nos valores estabelecidos. Este resultado nos induz a pensar que quanto maior for a razão entre as massas das partículas, ou seja, quanto maior for o valor do parâmetro γ , mais os pontos se aproximariam do GOE. Deixaremos esta questão em aberto por enquanto, retornando a ela um pouco mais

adiante ainda dentro deste capítulo.

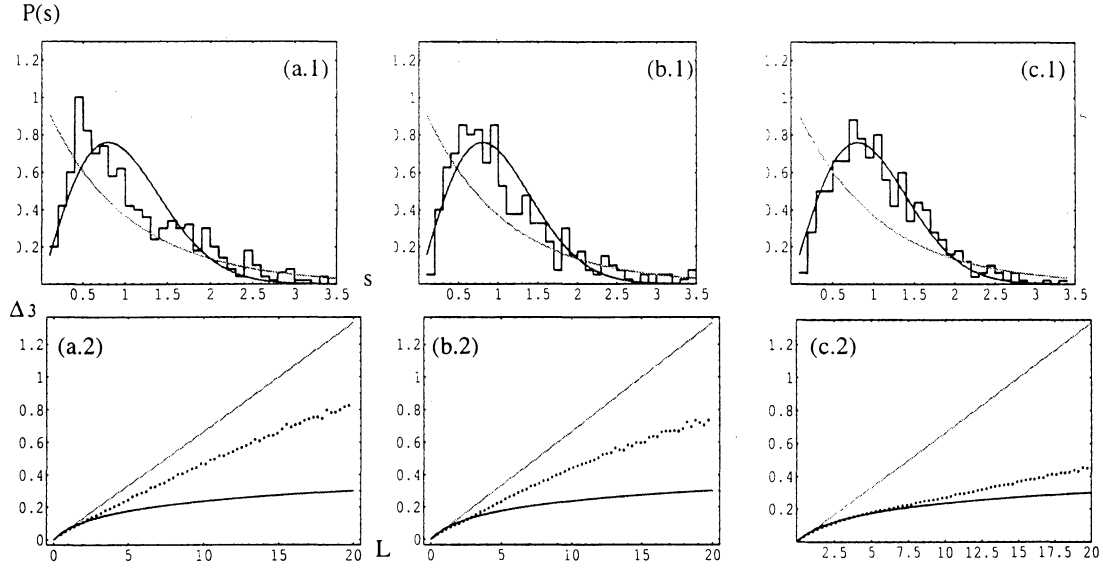


Figura 7.8: Estatísticas $P(s)$ nas figuras superiores e estatísticas $\overline{\Delta_3}$ nas inferiores, todas para $V_0 = 5,0$ e $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$. Nas figuras (a.1) e (a.2) temos $\gamma = 1,3$. Em (b.1) e (b.2) temos $\gamma = 2,0$. Em (c.1) e (c.2) temos $\gamma = 15$.

Para $V_0 = 10$ temos o máximo valor deste parâmetro (dentre os que variamos no trabalho) e consequentemente o caso de maior intensidade do potencial. Usamos ainda $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$, valor em que o potencial tem mais longo alcance (também dentre os valores assumidos no trabalho). Novamente ao variarmos o parâmetro γ entre os valores 1,3; 2,0 e 15, obtivemos os resultados mostrados na figura 7.9. As estatísticas foram realizadas, neste caso, com os 400 primeiros níveis. Os valores do primeiro e do 400º nível de energia para estes três valores de γ ($\gamma = 1,3$; 2,0 e 15) são respectivamente, 23,91 e 2287, 22,26 e 1856 e 13,09 e 693,4. O potencial neste caso, considerando as partículas afastadas de uma distância de 0,1, por exemplo, vale 100,0.

Dentre as variações de parâmetros que fizemos ao longo do trabalho, temos que a dinâmica do sistema mais se aproxima de um comportamento caótico quando o parâmetro V_0 assume o valor 10, α tem o valor $5,0 \times 10^{-3}$ e γ assume o valor 15. Foi possível notar até agora que ao aumentarmos a intensidade do potencial

de interação entre as partículas, a dinâmica do sistema vai se aproximando cada vez mais do caso caótico. Portanto, era esperado que para o maior valor de V_0 (dentro os que variamos) tivéssemos um resultado mais próximo de uma dinâmica caótica. Em relação a α também já foi possível observar nas estatísticas anteriores que quando este parâmetro assume seu valor mínimo ($5,0 \times 10^{-3}$), a dinâmica se aproxima do comportamento caótico. Quanto ao parâmetro γ , da razão entre as massas, é interessante observar que numa colisão clássica de duas partículas de massas diferentes, quando uma das partículas tem massa muito maior que a outra, a dinâmica desta partícula é simples pois apenas a partícula mais leve altera seu movimento. Se a partícula mais pesada está em movimento, ela continua com sua velocidade praticamente inalterada após o choque. Se ela está parada, assim ela permanece, e a partícula mais leve inverte o sentido de sua velocidade após se chocar. Neste caso da partícula mais pesada parada, ela se comportaria como um obstáculo dentro do bilhar, o que nos leva a um tipo de bilhar que foi apresentado no capítulo 3, o bilhar anular, que tem sua dinâmica caótica para uma partícula que se move no domínio entre as duas circunferências, sendo que os centros das circunferências não coincidem. Veja figura 3.2 (capítulo 3). Esta pode ser, portanto, uma explicação razoável para descrever a dinâmica caótica encontrada quando $\gamma = 15$.

Mostramos na figura 7.6 que para $\gamma = 1,1$ já temos uma considerável mudança no comportamento do sistema. Investigamos então como o sistema composto por partículas que obedecem esta razão entre as massas se comportaria sob mudança do parâmetro α , mantendo V_0 fixo. Os resultados obtidos estão na figura 7.10. É interessante observar nesta figura como a sequência (crescente) dos valores do parâmetro α , que representa o alcance do potencial, influencia nas estatísticas de maneira que os pontos se aproximem de um resultado integrável.

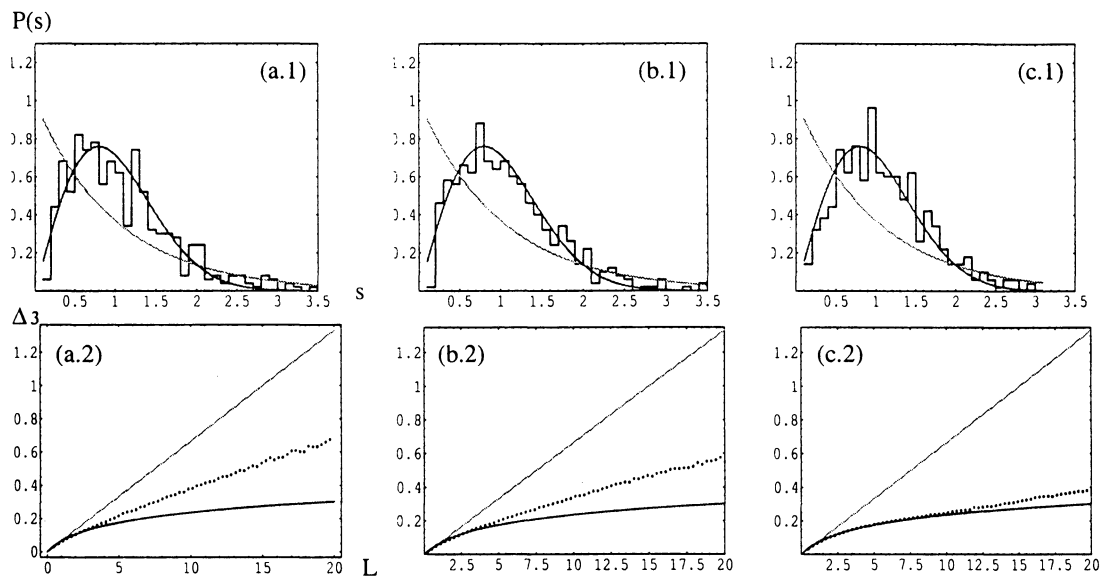


Figura 7.9: Estatísticas $P(s)$ nas figuras superiores e estatísticas $\overline{\Delta_3}$ nas inferiores, todas para $V_0 = 10$ e $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$. Nas figuras (a.1) e (a.2) temos $\gamma = 1, 3$. Em (b.1) e (b.2) temos $\gamma = 2, 0$. Em (c.1) e (c.2) temos $\gamma = 15$.

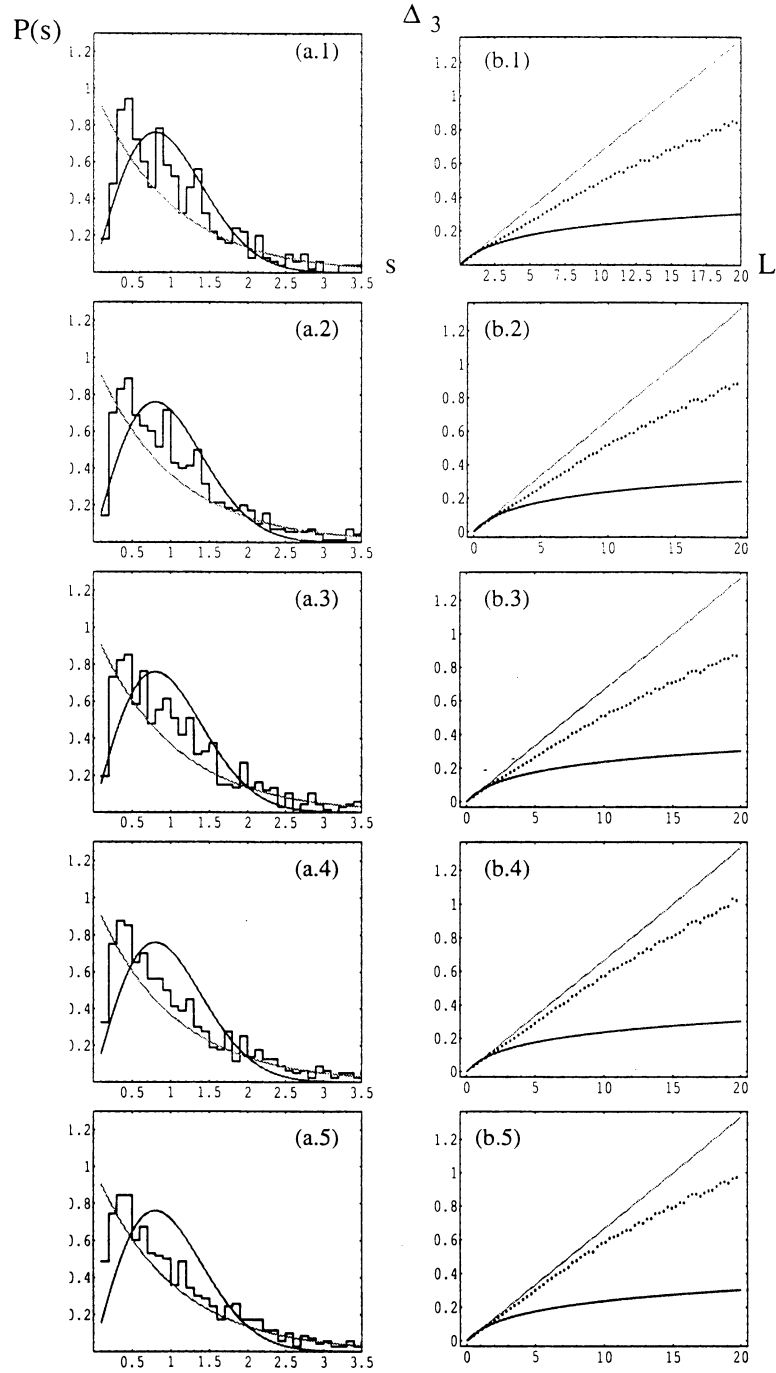


Figura 7.10: Estatísticas $P(s)$ nas figuras à esquerda e estatísticas $\overline{\Delta_3}$ nas figuras à direita, todas para $V_0 = 5,0$ e $\gamma = 1,1$. O parâmetro α assume os valores $5,0 \times 10^{-3}$; $5,0 \times 10^{-1}$; $1,0$; $5,0$ e 10 nas figuras (a), (b), (c), (d) e (e), respectivamente.

Da mesma forma que para $\gamma = 1,1$ fizemos a mudança do parâmetro α também para $\gamma = 15$. Observe a figura 7.11. Neste caso, a figura (a.1) apresenta uma estatística que concorda melhor com as curvas que indicam caos no sistema. Tomando o exemplo anterior, onde $\gamma = 1,1$, conforme aumentamos o valor de α o sistema tenderia a se aproximar do caso integrável mas isto não ocorre de forma tão evidente neste caso. Possivelmente devido ao maior valor da razão entre as massas, apenas a mudança do parâmetro α (de alcance do potencial) não é suficiente para alterar de maneira significativa a dinâmica do sistema.

Fazendo esta mesma sequência do parâmetro α para $V_0 = 10$, passamos a ter de forma mais significativa o problema já citado anteriormente, da convergência dos autovalores. Deste modo tomamos como base os resultados anteriores e só fizemos os cálculos usando $V_0 = 10$ para os valores extremos de α ($\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$ e $\alpha = 10$) já que são os casos onde temos mudanças mais significativas na dinâmica. Os resultados obtidos para $\gamma = 1,1$ e $\gamma = 15$ estão na figura 7.13.

Encerramos aqui as estatísticas para o sistema formado pelas partículas com massas diferentes e $L = 0$, mas ainda antes de finalizar esta seção voltemos ao parâmetro γ , que representa a razão entre as massas das partículas. Observamos nas figuras 7.7, 7.8 e 7.9 a maneira como as estatísticas mudam sob sua variação. Para ter uma visão mais geral deste fato plotamos a distância entre os pontos finais que aparecem na estatística $\overline{\Delta}_3$ (observe a figura 7.12) e o eixo horizontal em função de γ . Observe nas figuras 7.14 e 7.15 os gráficos para $V_0 = 5,0$ com $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$ e $V_0 = 5,0$ com $\alpha = 10$, respectivamente. Podemos notar que existe uma oscilação conforme aumentamos o valor do parâmetro γ e não um comportamento linear, conforme sugeriram as figuras anteriores.

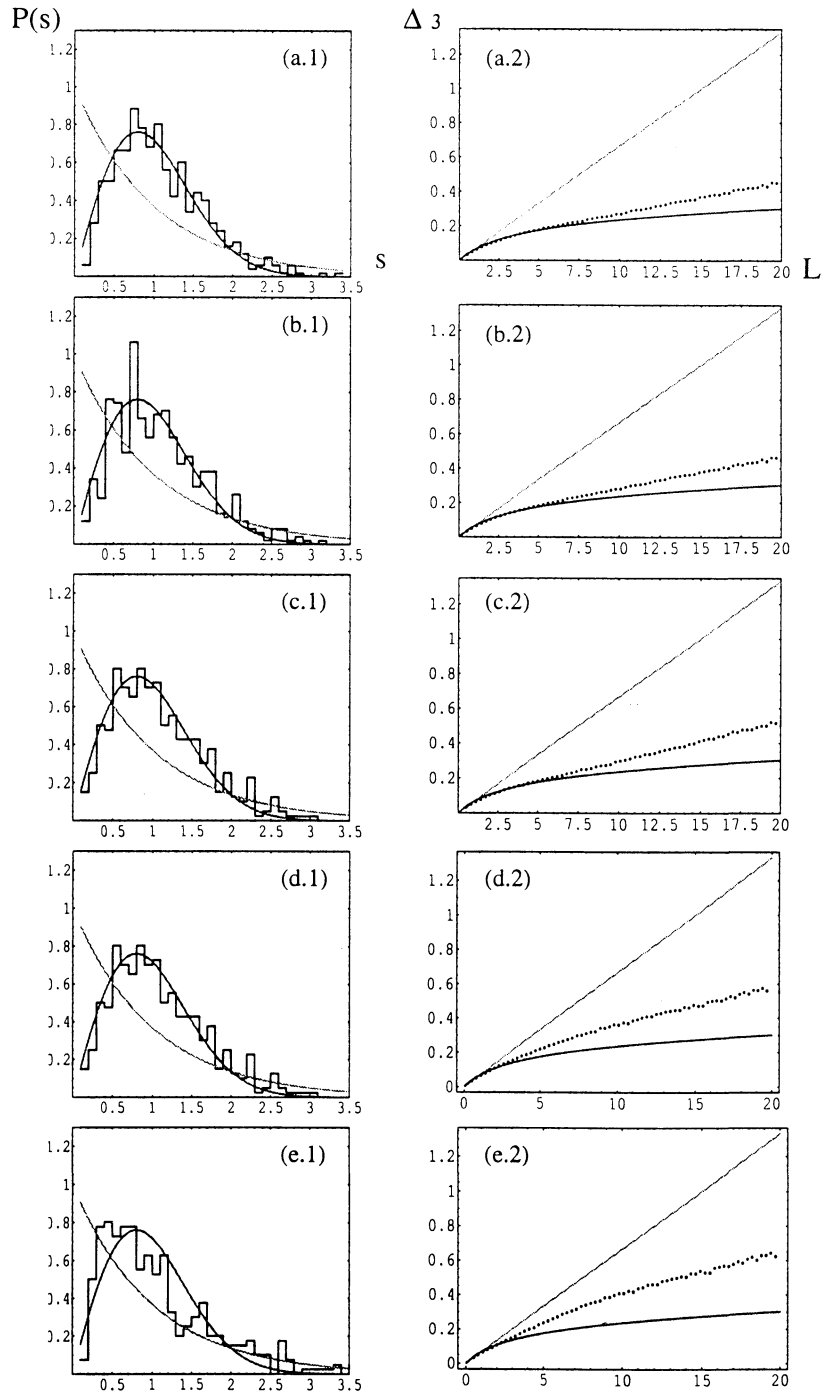


Figura 7.11: Estatísticas $P(s)$ nas figuras à esquerda e estatísticas $\overline{\Delta_3}$ nas figuras à direita. Todas para $V_0 = 5,0$ e $\gamma = 15$. O parâmetro α assume os valores $5,0 \times 10^{-3}$; $5,0 \times 10^{-1}$; $1,0$; $5,0$ e 10 nas figuras (a), (b), (c), (d) e (e), respectivamente.

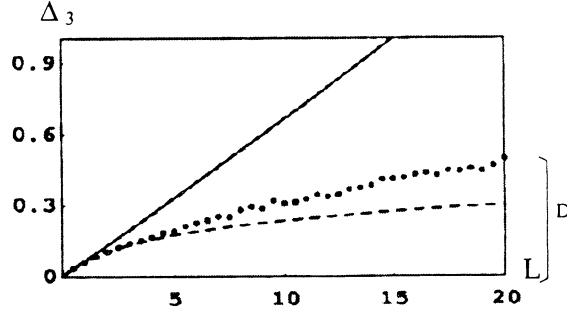


Figura 7.12: Distância D entre os pontos finais que aparecem na estatística $\overline{\Delta}_3$ e o eixo das abscissas.

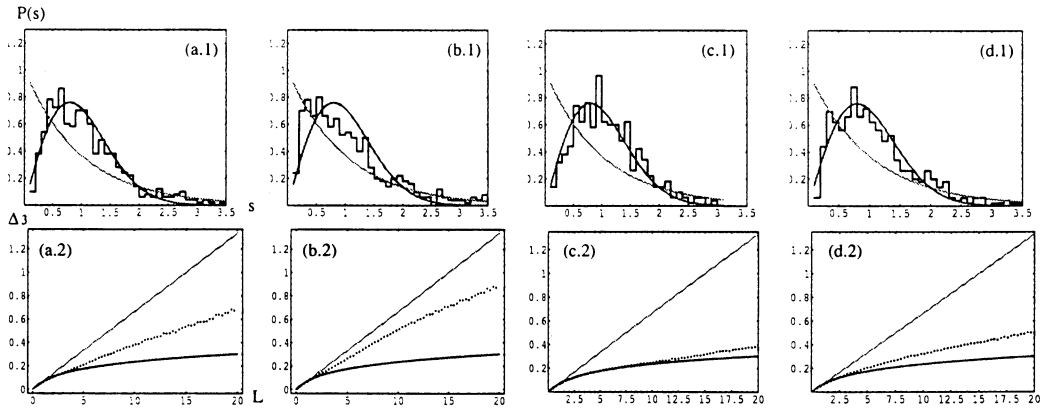


Figura 7.13: Estatísticas $P(s)$ nas figuras superiores e estatísticas $\overline{\Delta}_3$ nas inferiores, todas para $V_0 = 10$. Nas duas primeiras figuras (da esquerda para a direita) temos $\gamma = 1, 1$, sendo $\alpha = 5, 0 \times 10^{-3}$ e $\alpha = 10$ respectivamente. Temos $\gamma = 15$ nas duas outras à direita e também $\alpha = 5, 0 \times 10^{-3}$ e $\alpha = 10$ respectivamente.

Conforme foi comentado no capítulo 3, quando a razão entre as massas é tal que η é um número racional (veja equações 3.1 e 3.2) a dinâmica do sistema é regular. Os gráficos a seguir concordam com este resultado em alguns pontos pois aparecem picos nas figuras 7.14 e 7.15 para alguns valores racionais de η . Isto indica um resultado da estatística $\overline{\Delta}_3$ a respeito de uma dinâmica regular.

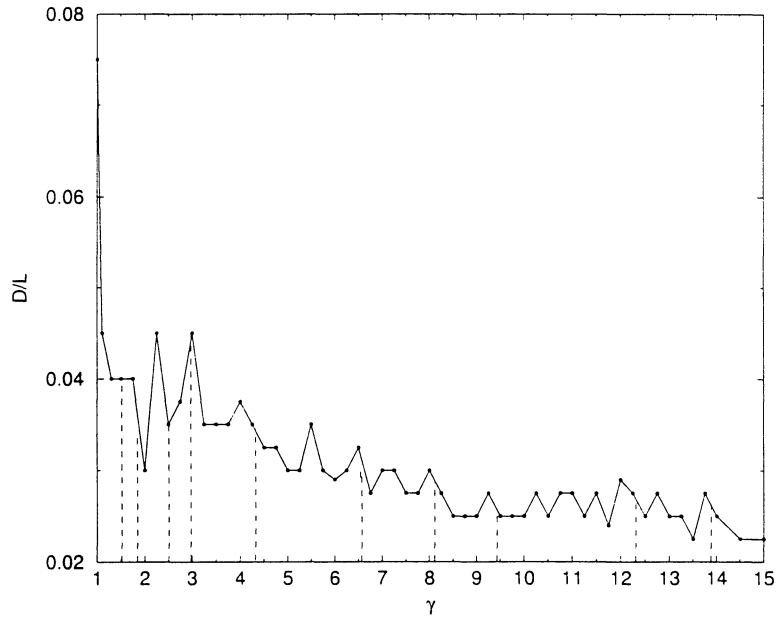


Figura 7.14: Gráfico da distância D (demonstrada na figura 7.12) em função de γ . Os valores de γ foram plotados num passo de 0,25 entre os valores 1 e 15. Temos no eixo vertical os valores de D divididos por 20. Os parâmetros α e V_0 estão fixos com valores $5,0 \times 10^{-3}$ e 5,0, respectivamente.

Mostramos na tabela 7.1 alguns valores de η e o correspondente valor de γ para os quais os resultados coincidem aproximadamente com os picos da figura 7.15.

η	$\frac{10}{7}$	$\frac{3}{5}$	$\frac{9}{4}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{5}{7}$	$\frac{13}{17}$	$\frac{11}{14}$	$\frac{6}{5}$	$\frac{14}{17}$	$\frac{5}{6}$
γ	1,5	1,8	2,5	3,0	4,3	6,6	8,1	9,4	12,3	13,9

Tabela 7.1: Relação dos valores de η e γ para os quais temos um número racional que coincide com os picos da figura 7.15.

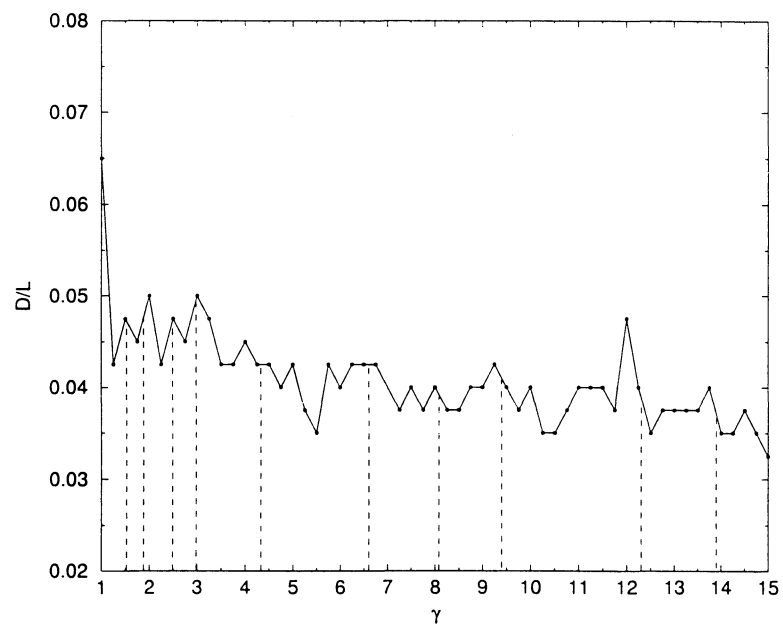


Figura 7.15: Gráfico da distância D (demonstrada na figura 7.12) em função de γ . Os valores de γ foram plotados num passo de 0,25 entre os valores 1 e 15. Temos no eixo vertical os valores de D divididos por 20. Os parâmetros α e V_0 estão fixos com valores 10 e 5,0, respectivamente.

Comparando as figuras 7.15 e 7.14 notamos que a figura 7.15 concorda melhor com este resultado citado acima [15]. Analisando a física que envolve os parâmetros usados para as duas situações, que trazem os resultados mostrados nas figuras 7.14 e 7.15, lembramos que $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$ no primeiro caso e $\alpha = 10$ no segundo. Desta forma, quando $\alpha = 10$ temos um menor alcance do potencial, o que permite que as partículas interajam de forma mais próxima do modelo clássico para o qual os resultados foram obtidos.

7.2.2 $L = 1$ e $L = 2$

Apresentamos nas figuras 7.16 e 7.17 as estatísticas para $L = 1$ e $L = 2$ e o que os resultados nos sugerem é que também neste caso, onde as partículas têm massas diferentes, ao variarmos o momento angular do sistema não temos mudanças significativas na dinâmica. Em outras palavras, comparando aos resultados anteriores, parece que mantendo fixos os valores de V_0, α e γ ; apenas a mudança do momento angular total das partículas não é suficiente para alterar a dinâmica. Por este mesmo motivo não incluímos neste capítulo as figuras referentes ao $L = 3$.

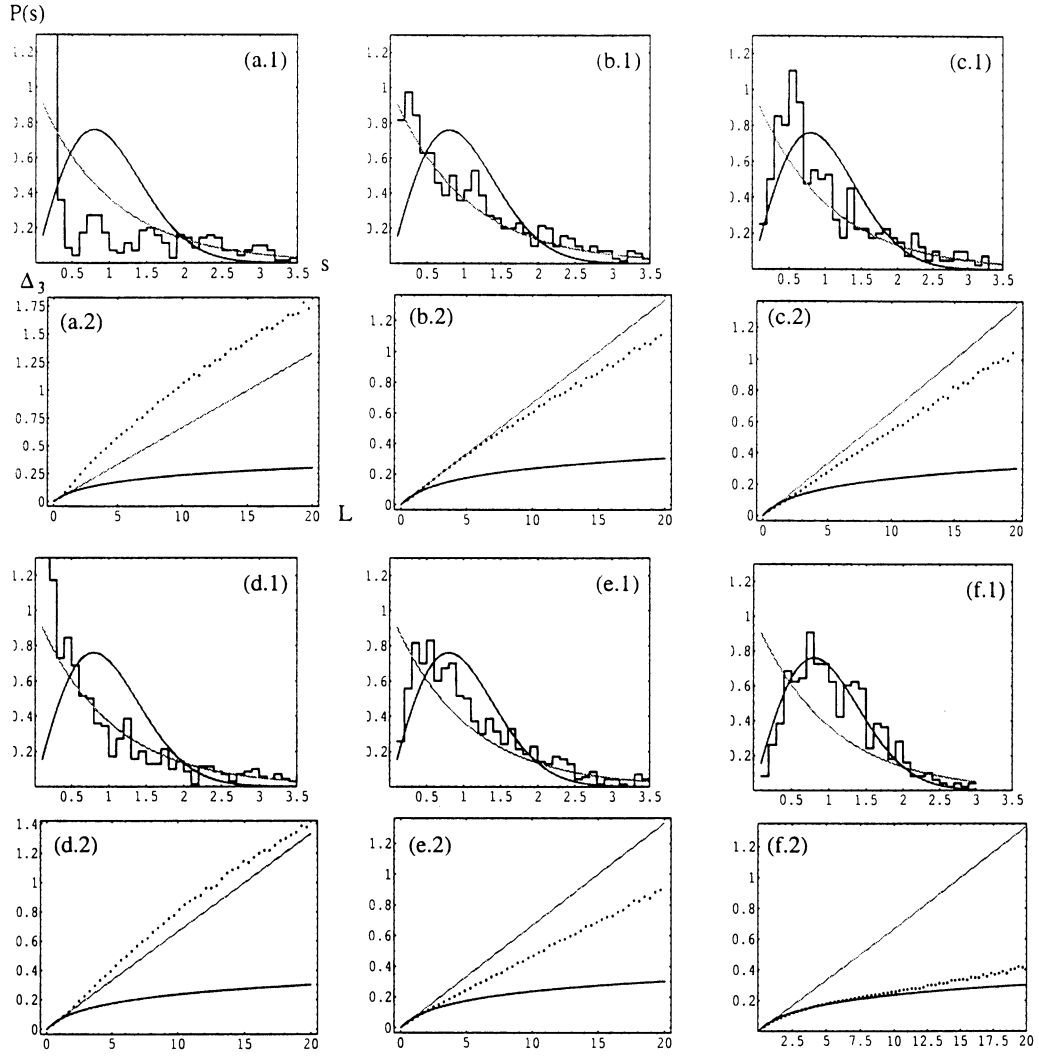


Figura 7.16: Estatísticas $P(s)$ e estatísticas $\overline{\Delta}_3$, todas para $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$. Nas figuras (a.1), (a.2), (b.1), (b.2), (c.1) e (c.2) temos $V_0 = 1,0$. Nas figuras (d.1), (d.2), (e.1), (e.2), (f.1), e (f.2) temos $V_0 = 5,0$. O parâmetro γ é igual a 1,0 nas figuras (a.1), (a.2), (d.1) e (d.2); igual a 1,1 nas figuras (b.1), (b.2), (e.1) e (e.2) e igual a 15 nas figuras (c.1), (c.2), (f.1) e (f.2).

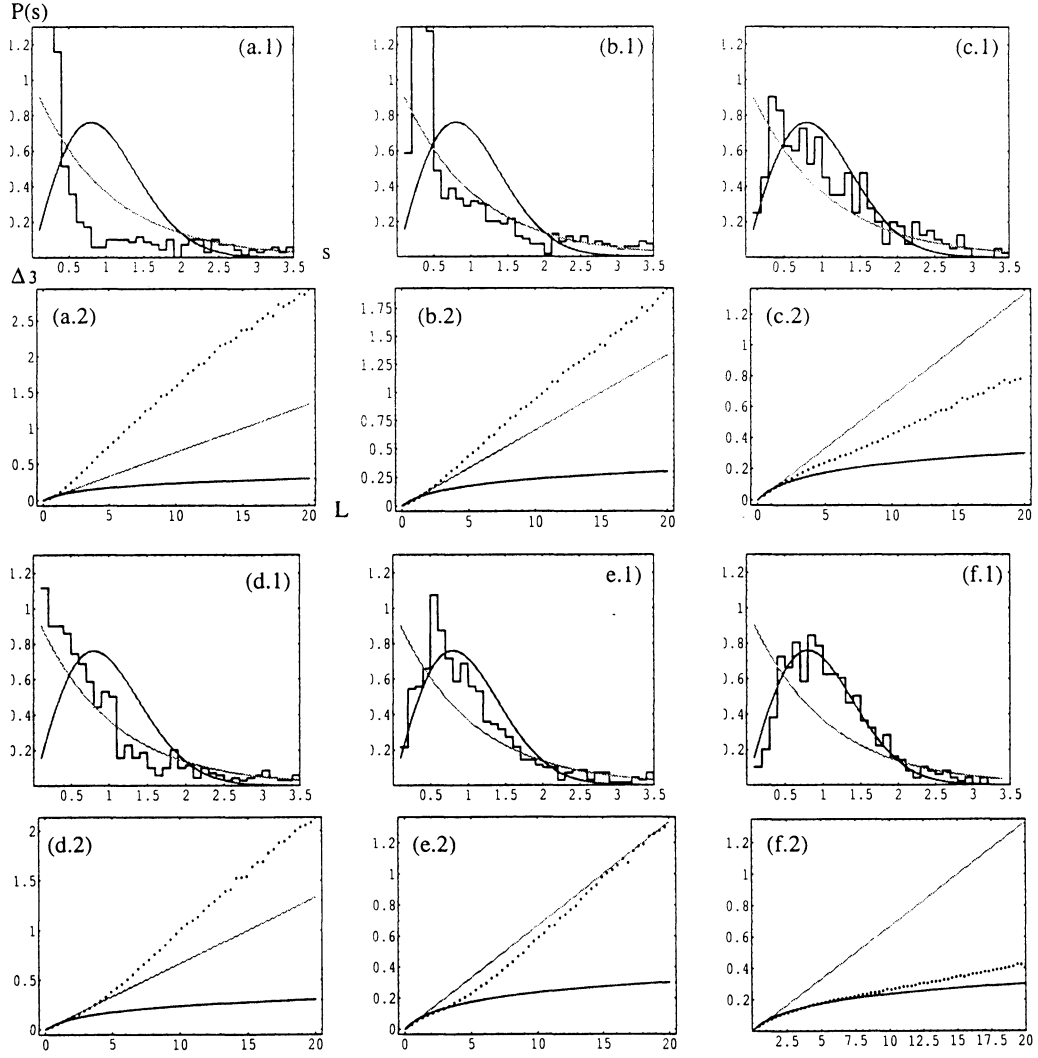


Figura 7.17: Estatísticas $P(s)$ e estatísticas $\overline{\Delta_3}$, todas para $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$. Nas figuras (a.1), (a.2), (b.1), (b.2), (c.1) e (c.2) temos $V_0 = 1,0$. Nas figuras (d.1), (d.2), (e.1), (e.1), (f.1), e (f.2) temos $V_0 = 5,0$. O parâmetro γ é igual a 1,0 nas figuras (a.1), (a.2), (d.1) e (d.2); igual a 1,1 nas figuras (b.1), (b.2), (e.1) e (e.2) e igual a 15 nas figuras (c.1), (c.2), (f.1) e (f.2).

7.3 Repulsão dos níveis

Conforme vimos nos capítulos 2 e 3, para sistemas que têm uma distribuição GOE, existe uma tendência de repulsão entre os níveis de energia de mesma simetria. Apresentaremos a seguir, nas figuras 7.18 e 7.19, os gráficos referentes a repulsão entre os níveis de energia. Plotamos nestes gráficos como os níveis de energia variam em função do parâmetro V_0 . Após fazer a ampliação de todos os pontos que em poderia haver o cruzamento dos níveis de energia observamos que as curvas do gráfico realmente não se cruzam. Isto demonstra o fenômeno de repulsão entre os níveis. Este comportamento é típico de sistemas quânticos que apresentam dinâmica caótica. Portanto, escolhemos o caso (segundo a combinação dos parâmetros) em que as estatísticas apontaram de forma mais evidente para um comportamento caótico, ou seja, quando $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$ e $\gamma = 15$. No caso de um sistema quântico com uma dinâmica regular pode haver cruzamentos entre as curvas do gráfico.

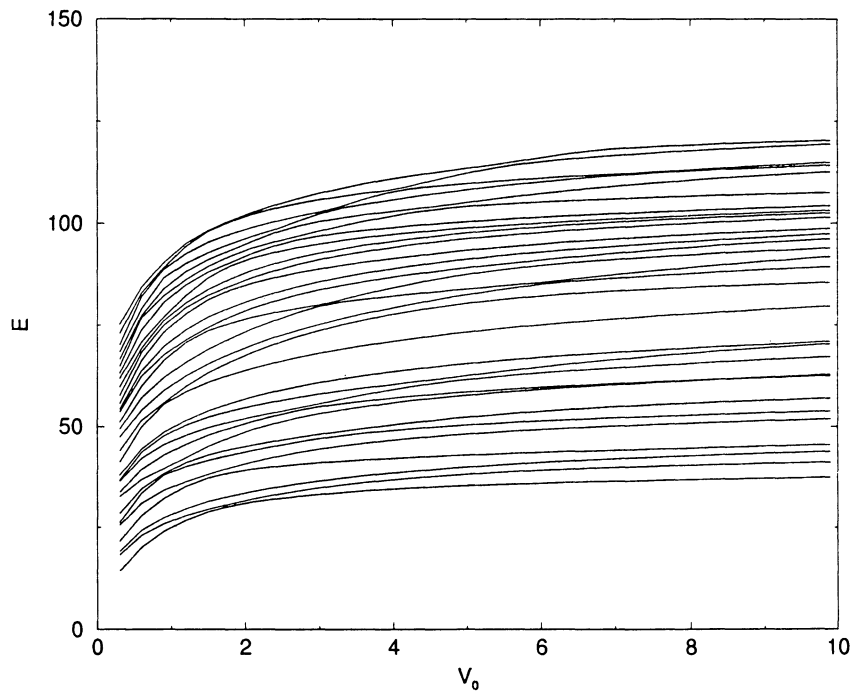


Figura 7.18: Vinte e oito primeiros níveis em função do parâmetro V_0 . Os níveis de energia são relativos ao sistema das duas partículas com parâmetros $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$ e $\gamma = 15$.

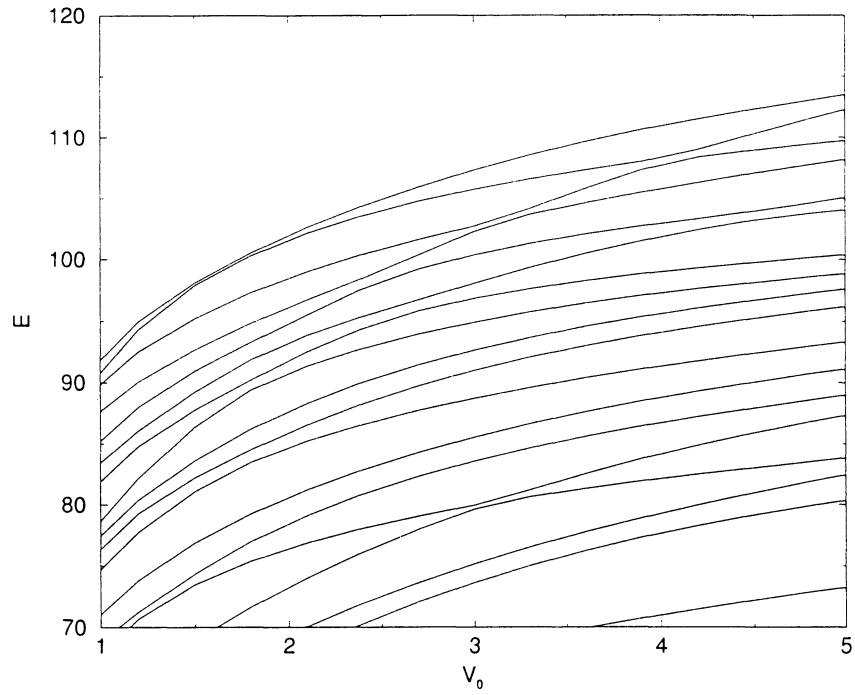


Figura 7.19: Ampliação da figura 7.18.

Apresentamos nas figuras 7.20 e 7.21 os gráficos para o sistema com massas iguais e $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$. Observamos na figura 7.21 que ocorre o cruzamento de dois níveis de energia.

Observamos nesta última seção que embora “fraca” existe a repulsão de níveis de energia esperada para sistemas considerados caóticos.

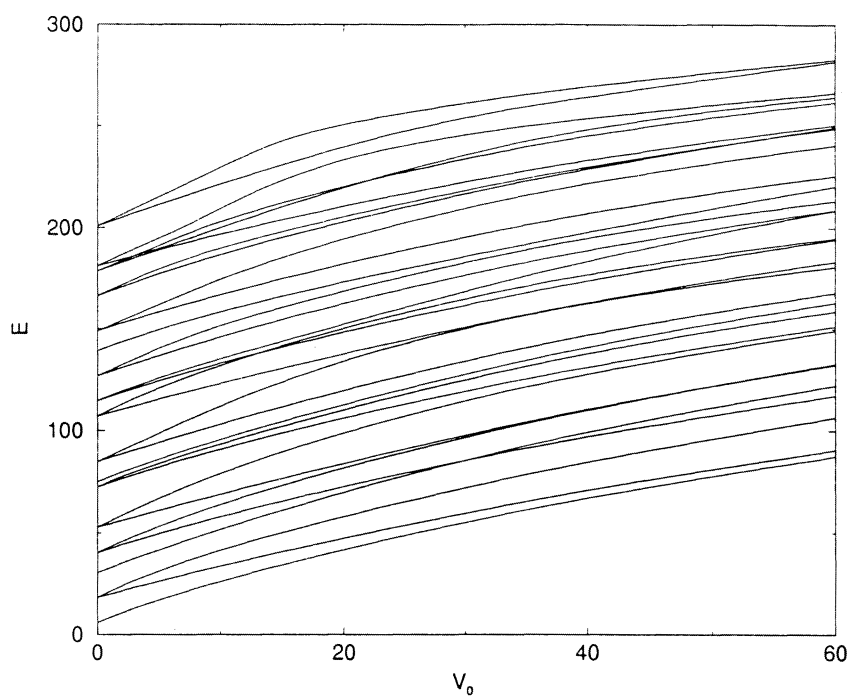


Figura 7.20: Vinte e oito primeiros níveis em função do parâmetro V_0 . Os níveis de energia são relativos ao sistema das duas partículas com parâmetros $\alpha = 5,0 \times 10^{-3}$ e $\gamma = 1,0$.

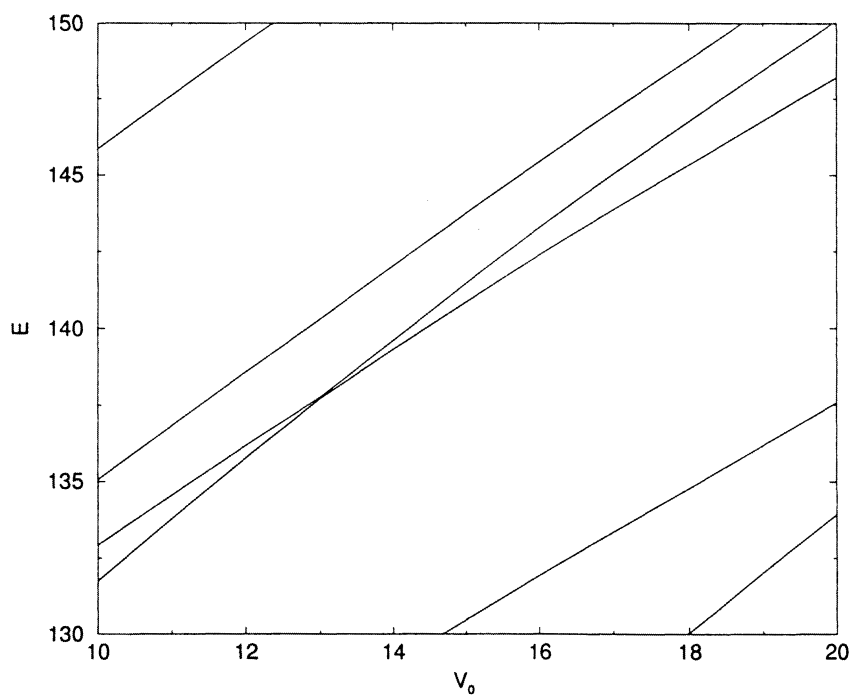


Figura 7.21: Ampliação da figura 7.20.

Capítulo 8

Conclusões

Este trabalho foi motivado principalmente pelo fato de modelos quânticos capazes de tratar a dinâmica de partículas confinadas ser uma área relativamente nova. Também pela aplicação em sistemas realísticos, como por exemplo, utilizar tais modelos para tratar quantitativamente as interações dos quarks dentro de um nucleon. Nosso objetivo foi então estudar como seria esta dinâmica, a princípio em sistemas com duas partículas num bilhar quântico circular e talvez, em trabalhos futuros, darmos continuidade a pesquisa para sistemas de três ou mais partículas. As ferramentas matemáticas e computacionais exigidas se mostraram complicadas durante o desenvolvimento do trabalho, e aparentemente este problema se agrava conforme aumentamos o número de partículas, ou graus de liberdade, do sistema que pretendemos analisar.

Utilizando como base os resultados do bilhar com uma e duas partículas livres chegamos ao problema das partículas interagentes dentro do bilhar. Nos preocupamos até aqui em entender, tanto qualitativamente como quantitativamente, como seria a dinâmica deste sistema interagente. Conseguimos calcular os elementos de matriz do Hamiltoniano do sistema com as duas partículas interagindo via um potencial do tipo Yukawa, expandindo o caso interagente na base de autovetores do sistema formado pelas partículas livres. Por uma adequada mudança de variáveis pudemos reescrever as integrais dos elementos de matriz de forma a facilitar os cálculos. Ainda na parte analítica do trabalho, ao examinarmos estas novas integrais que dariam origem aos elementos da matriz, descobrimos que para determinada relação entre

os números quânticos m e q ($m_1 + m_2 \neq q_1 + q_2$) os elementos da matriz seriam iguais a zero. Verificamos assim mais uma quantidade conservada no sistema, o momento angular (uma vez que os números quânticos m_1 , m_2 , q_1 e q_2 estão relacionados ao momento angular das partículas 1 e 2, respectivamente, antes e depois da colisão). Este fato nos permitiu, através de uma adequada montagem da matriz, diagonalizá-la em blocos, separando as simetrias e evitando assim que misturássemos níveis de energia não correlacionados no momento de fazer as análises estatísticas. Através da diagonalização da matriz encontramos os autovalores, chegando assim aos níveis de energia.

Os parâmetros relevantes do problema foram o alcance (α) e a intensidade (V_0) do potencial e o parâmetro γ que dá a razão $\frac{\mu_2}{\mu_1}$ entre as massas das partículas 2 e 1, respectivamente. Utilizando as estatísticas de níveis $P(s)$ e $\overline{\Delta_3}$, foi possível observar como se comporta a dinâmica do sistema sob a mudança destes parâmetros que fizemos exaustivamente ao longo do estudo.

Em relação ao parâmetro γ , observamos que o fato de haver ou não uma diferença entre as massas das partículas demonstrou ser um fator fundamental para o tipo de comportamento do sistema (no sentido dele ser integrável, caótico ou misto). Além disso, observamos também que para determinadas razões entre as massas o sistema tende novamente para um comportamento regular, o que nos leva a resultados no caso bidimensional em concordância com outros já encontrados em sistemas unidimensionais.

Ao variarmos a intensidade do potencial (V_0) nos valores 1,0; 5,0; e 10, observamos uma diferença nas estatísticas dos níveis, mas não obtivemos resultados que indicassem caos, caso as massas das partículas fossem iguais. Sendo assim, a influência deste parâmetro é realçada pelo parâmetro γ , levando o sistema do caso regular para uma dinâmica caótica, conforme aumentávamos seu valor. Nesta parte fizemos também uma conexão com a dinâmica clássica através do estudo de possíveis colisões que levam a uma dinâmica regular.

É possível notar também alterações na dinâmica do sistema ao variarmos o parâmetro α , mas este efeito se torna mais ou menos intenso dependendo

de como ele está combinado com os outros parâmetros comentados anteriormente.

Em relação ao momento angular das partículas, ao variá-lo nos valores 0, 1 e 2, não foi percebida uma modificação relevante no comportamento do sistema. Alguns cálculos começaram a ser feitos para momento angular igual a 3, mas como os resultados continuavam se mantendo inalterados não seguimos adiante.

De forma geral observamos que no espaço dos parâmetros α , V_0 e γ considerados, existe aparentemente uma grande região envolvendo uma dinâmica mista. Acreditamos que isto está relacionado com a dinâmica complexa de duas partículas interagente em duas dimensões e a simetria simples imposta pelo bilhar circular. Uma análise clássica deste problema poderia esclarecer este ponto, sobre o motivo de se ter esta dinâmica mista para uma grande região do espaço de parâmetros.

Analizamos um sistema bidimensional com apenas duas partículas interagentes, objetivando dar os primeiros passos na tentativa de oferecer modelos quânticos para situações reais de muitas partículas. Desta forma abre-se a possibilidade de realizarem-se muitos trabalhos. Um deles seria fazer o bilhar circular quântico com três partículas interagentes. Os resultados aqui apresentados podem ser úteis considerando-se a interação entre as três partículas como sendo de duas a duas. Pode-se também dar continuidade aos estudos para duas partículas, investigando-se mais a fundo, por exemplo, a relação do tipo de dinâmica do sistema com a razão entre as massas das partículas. Este estudo poderia ser feito de maneira extremamente detalhada e quantitativa.

Bibliografia

- [1] M.-J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin, editors. *Chaos and Quantum Physics*. Les Houches, Session LII, North-Holland, 1989.
- [2] M.V. Berry. Some Quantum-to-classical asymptotics. In M.-J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin, editors, *Chaos and Quantum Physics* page 251. Les Houches Session, LII North-Holland, 1989.
- [3] M.V. Berry. The Bakerian lecture, 1987: *Quantum Chaology*. Proc. R. Soc. Lond. A **413**, 183 (1987).
- [4] V. Zelevinsk. Int. J. Mod. Phys. B **13**, 569 (1999).
- [5] H. Friederich and D. Wintgen. Phys. Rep. **183**, 37 (1989).
- [6] G. S. Ezra, K. Richter, G. Tanner, D. Wintgen. J. Phys. B **24**, L413 (1991); K. Richter, G. Tanner, D. Wintgen. PRA **48**, 4182 (1993); D. Wintgen, A. Burgers, K. Richter, G. Tanner. Prog. Theor. Phys. Supp. **116**, 121 (1994); K. Karremans, W. Vassen and W. Hogervorst. Phys. Rev. A **60**, 2275 (1999).
- [7] V. V. Flambaum, A. A. Gribakina, G. F. Gribakin and I. V. Ponomarev. Physica D **131**, 205 (1999); V. Zelevinsky. Int. J. Mod. Phys. B **13**, 569 (1999).
- [8] C. M. Marcus, S. R. Patel, A. G. Huibers, S. M. Cronenwett, M. Switkes, I. H. Chan, R. M. Clarke, A. J. Folk, S. F. Godijn, K. Campman and A. C. Gossard *Chaos, Solitons and Fractals* **8**, 1261 (1997).
- [9] L. Meza-Montes, S. E. Ulloa and D. Pfannkuche. Physica E **1**, 274 (1997); L. Meza-Montes, S. E. Ulloa. Physica B **249** 224 (1998).
- [10] S. E. Ulloa and D. Pfannkuche. Superlatt. and Microstruct. **21**, 21 (1997).
- [11] L. Hilico, B. Grémaud, T. Jonckheere, N. Billy and D. Delande. Phys Rev. A **66**, 022101-1 (2002).

- [12] T. Kawabe and S. Ohta. Phys. Rev. A **41**, 720 (1990).
- [13] M. Van Vessen Jr., M. C. Santos, Bin Kang Cheng and M. G. E. da Luz, Phys. Rev. E **64**, 026201 (2001).
- [14] I. K ouscer and A. Kodre *Mathematik in Physik und Technik*. Springer-Verlag Heidelberg 1993.
- [15] G. Casati and J. Ford, J. Comput. Phys. **20**, 97, (1976); J. L. Rouet, F. Blasco and M. R. Feix, J. Stat. Phys. **71**, 209 (1993); M. Hasegawa, Phys. Lett. A **242**, 19 (1998).
- [16] P. Seba. Phys. Rev. Lett. **64**, 1855 (1990); S. Albeverio and P. Seba. J. Stat. Phys. **64**, 369 (1991).
- [17] H. Goldstein *Classical Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company, 1980.
- [18] T. Guhr, A. M uller-Groeling, H. A. Weidenm uller. Phys. Rep. **299**, 189 (1998).
- [19] U. Haq, A Pandey, and O. Bohigas. Phys. Rev. Lett. **48**, 1086 (1982).
- [20] O. Bohigas, R.U. Haq, and A. Pandey. *Fluctuation Properties of Nuclear Energy levels and widths: comparison of theory with experiments*. In K.H. B ockhoff, editor, Nuclear Data for Science and Tecnology, page 809. Reidel, Dordrecht, 1983.
- [21] H-J St ockmann *Quantum Chaos, an Introduction*. Cambridge University Press, 1999.
- [22] O. Bohigas, M.J. Giannoni, and C. Schmit. Phys. Rev. Lett. **52**, 1 (1984).
- [23] M.L. Mehta. *Random Matrices*. Academic Press, San Diego, second edition, 1991.
- [24] F.Haake. *Quantum Signature of Chaos*. Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [25] E.P. Wigner, *Group Theory and its Application to the Quantum —Mechanics of Atomic Spectra*, Academic Press, New York, 1959.
- [26] J.F. Dyson, J. Math. Phys. **3**, 140 (1962).
- [27] J.F. Dyson and M. L. Mehta. J. Math. Phys. **4**, 489 (1963)

- [28] A. G. Miltenburg and T. W. Ruijgrok. *Physica A*, **210**, 476 (1994).
- [29] E. J. Heller. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1515 (1984).
- [30] P. Seba and K. Zyczkowski. *Phys Rev. A* **44**, 3457 (1991).
- [31] Y.G. Sinai, *Funct. Anal. Appl.* **2**, 61 (1968).
- [32] L.A. Bunimovich. *Funct. Anal. Appl.* **8**, 254 (1974).
- [33] Y.G. Sinai, L.A. Bunimovich. *Commun. Math. Phys.* **78**, 247 (1980).
- [34] S.W. McDonald, A.N. Kaufman. *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1189 (1979).
- [35] M. Robnik, *J. Phys. A* **17**, 1049 (1984).
- [36] O. Bohigas, D. Boosé, R. Egydio de Carvalho, V. Marvulle, *Nucl. Phys. A* **560**, 197 (1993).
- [37] D. Delande *Chaos and Quantum Physics Course* **10** (1989).
- [38] L. G. G. V. Dias da Silva and M. A. M. de Aguiar. *Phys. Rev. B* **66**, 165309 (2002).
- [39] W. H. Press, W. T. Vetterling, S. A. Teukolsky, B. P. Flannery *Numerical Recipes in Fortran*. Cambridge University Press, 1992.
- [40] C. L. Pekeris. *Phys. Rev.* **112**, 1649 (1958).
- [41] E. Butkov *Física Matemática*. Editora Guanabara, 1988.
- [42] J.J. Sakurai *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, 1994.
- [43] M. C. Gutzwiller *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. Springer-Verlag New York, 1990.